物理学词典

徐龙道　等　编著

科　学　出　版　社
北　京

内 容 简 介

本词典收集了物理学多个学科的常用、基础和必要的名词术语5000余条，并提供简明扼要的定义或概念解释，内容涵盖：物理学总论、力学、热学、声学、电磁学、光学、原子和分子物理学、电动力学、无线电物理学、热力学、统计物理学、量子力学、量子场论、原子核物理学、粒子物理学、固体物理学、低温物理学、半导体物理学、磁学、液晶、等离子体物理学、相对论、天体物理学、生物物理学、医学物理学、非线性物理学、计算物理学等，书后附有物理学常用资料及中英文词目索引。

本书适合本科及本科以上学历读者使用，是广大物理学工作者和相关学科专业人员、物理教学科研工作者及大专院校师生的便利参考工具。

图书在版编目(CIP)数据

物理学词典/徐龙道等编著.—北京：科学出版社，2004.5
(科学版词典系列)
ISBN 7-03-009564-2

Ⅰ.物…　Ⅱ.徐…　Ⅲ.物理学-词典　Ⅳ.O4-61

中国版本图书馆CIP数据核字(2001)第040810号

责任编辑：黄　海　顾英利／责任校对：鲁　素
责任印制：安春生／封面设计：王　浩

科学出版社 出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

中国科学院印刷厂 印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销
*

2004年5月第　一　版　　开本：A5(890×1240)
2005年5月第二次印刷　　印张：34 5/8
印数：3 001—5 000　　字数：1 746 000

定价：85.00元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈新欣〉)

物理学词典编委会

前　　言

物理学作为一门带头性的基础学科,是技术革命的先导,并广泛应用、渗透于自然科学和社会科学的各个领域,产生许多交叉学科、边缘学科、应用学科和新兴学科。物理学的成就对推动科学和高新技术的发展起着不可替代的重要作用。新世纪已经到来,我们面临着科学进步日新月异、人才竞争更趋激烈的严重挑战,时不我待,必须迅速而有效地提高广大青年学生的科学素质及创新能力。

本词典的读者以大学本科生为主,同时兼顾研究生。它也适合于大学和中学有关教师以及广大物理学工作者和相关学科专业人员阅读。本着"教育要面向现代化、面向世界、面向未来"的精神,希望在帮助读者掌握物理学基础知识,提高物理学素养,拓宽知识面,增强应用物理学知识分析问题、解决问题的能力方面起到积极的作用,获得良好的效果。为此,力求形成如下特色:

1. 收词的面宽广一些

收词范围涵盖物理等专业本科的基础课程、专业课程并适当延伸至有关的研究生学位课程,包括力学、热学、声学、电磁学、光学、原子和分子物理学、电动力学、无线电物理学、热力学、统计物理学、量子力学、量子场论、原子核物理学、粒子物理学、固体物理学、低温物理学、半导体物理学、磁学、液晶、等离子体物理学、相对论、天体物理学、生物物理学、医学物理学、非线性物理学、计算物理学等。

2. 描述精细一些

词条的阐述以内涵为主,外延为辅;以定性为主,定量为辅。着重对物理学的现象、概念、原理、定理、定律、理论等,作定性的或定量的描述。必要时借助图表进行阐述,写出基本的或重要的公式并说明其物理意义。部分词条还就其某些重要应用、与外部的关系等予以拓展,给出必要的叙述。这样,就显得有血有肉、较为清晰,便于理解。还有一部分词条内容丰富,涉及的问题较多,它们往往都包含了若干较小的但不宜单独撰写的词条,如需阅读这些较小的词条时,可参见有关词条,如此安排既保持了相互之间的内在联系,比较科学系统,又节省了篇幅。

3. 内容新颖一些

撰写人员吸取了教学和科研工作的成果和经验,力求将词条写得富有新意,且反映本学科的一些新成就和新动态。

本词典涉及面广，工作量大，参加编写的人数较多，写作风格有所差异，且水平有限，存在某些缺点和不足甚至谬误之处在所难免，敬请专家和读者们批评指正，不胜感谢。非常荣幸地聘请中国科学院院士魏荣爵、冯端、王业宁、闵乃本、张淑仪等教授以及南京大学校长蒋树声教授担任本词典的顾问，得到他们的大力支持和指导，冯端院士和张淑仪院士还亲自撰写、审稿，在此谨表示衷心的感谢。南京大学物理系和电子科学与工程系的领导对词典的编写工作自始至终给予大力支持和热情关怀，物理系原系主任张世远教授直接参与组织领导并亲自撰写词条，谨致衷心的谢意。

徐龙道　欧阳容百

2004 年 2 月

使 用 说 明

1. 本词典内容涵盖物理学专业本科的基础课程、专业课程,并适当延伸至有关的研究生课程,还涉及当前科学研究中的主要热点新词新语。

2. 书中词条一般由以下三部分顺序组成:中文词目、英文词目、释文。词条的阐述以内涵为主、外延为辅,以定性为主、定量为辅,力求清晰明确、易于理解。

3. 一个词条的内容涉及其他词条或需由其他词条补充的,一般采用"参见"形式,以"见"字加"引号"标出。如:强光光学……见"非线性光学"。

4. 正文之后有诺贝尔物理奖简表、物理量单位与量纲、基本物理常数等6个附录。

5. 为方便查阅,书末设有两个索引。英文词目索引按英文字母顺序排列,其他字符不参加排序;中文词目索引主要按汉语拼音,并辅以汉字笔画、起笔笔形顺序排列。

目　　录

General Introduction of Physics
物理学总论

物理学是研究物质与运动的基本规律的科学,其内容包括物质的结构,物质间的各种基本相互作用和物质的一些基本运动形态等。

物质世界包罗万象,层次繁多。在小尺度(小于纳米)的微观领域内,存在有不同层次的粒子,诸如基本粒子、原子核、原子与分子等,相应地有物理学的分支学科,如粒子物理、原子核物理以及原子与分子物理。在人们感官可感知的宏观领域内,存在有不同的聚集态,诸如固态、液态、气态和等离子态,相应地有凝聚态(包括固态与液态)物理和等离子体物理等。众多物相可以汇聚成尺度更大的体系,诸如行星、恒星、星系、星系团等,乃至于囊括一切的宇宙,均可以作为物理学研究的对象。这些就构成与地球科学、天文学的交叉学科:地球物理、天体物理与宇宙学。

物质的基本相互作用目前已知共有 4 种,即长程的万有引力与电磁作用力和短程(局限于 10^{-15}m 之内)的弱作用力与强作用力。长程的相互作用是人们感官得以直接感知的,而短程相互作用仅出现在原子核内部和一些基本粒子之间。相互作用是通过场的媒介来传递的,引力场、电磁场与规范场即为其实例。因而对场的研究在现代物理学中也占有重要地位。

物理学所关注的运动形态,有宏观的,如机械运动、电磁现象与热现象,相应的学科为力学与声学、电磁学与光学、热学;也有微观的,如各个层次粒子的运动、跃迁与反应,构成了粒子物理、原子与分子物理所研究的对象。物质的运动总是在一定的空间和时间里呈现的,这样空间、时间及其参考系也成为物理学研究的对象。

实验研究是物理学的基础。精密的定量测量构成了物理学的特色。只有在取得大量的经验规律之后,方始可能建立融会贯通的理论体系。而这些理论又会对某些特定问题提出具体的预言,有待于物理实验来对之甄别,即予以证实或证伪。这样,经过了实验物理学家与理论物理学家的大量工作和反复推敲,去伪存真,使得物理学的理论具有了一定程度的可信性。当然,随着研究范围的扩大以及研究深度与精确度的提高,又会发现一些现象的实验结果与原有理论相悖,导致对理论的修正和更改,在某些情况下,甚至推翻原有的理论,建立新的理论。大量的例证存在于物理学史之中。

经典力学是物理学中最早成熟的分支学科。17 世纪初开普勒根据天文学的观测数据导出了行星运动三定律这个重要的经验规律。几乎同时,伽利略通过落体、抛物体和摆的实验,总结出动力学的初步理论。随后牛顿进行了深入的研究,总结出三条运动定律和万有引力定律,为经典力学奠定了基础。以后的发展体现于许多方面,一方面在应用上大见成效,其次是在表述上变换得更加精巧和具有普适性,进而推广到不同性质的媒质,分别创建了刚体力学,弹性力学,流体力学和声学(处理机械波的传播)。

电磁学在 18、19 世纪取得重大进展,通过库仑、安培、法拉第等人的实验研究,建立了有关静电、静磁与电磁现象的若干基本规律。集其大成的是 19 世纪下半叶的麦克斯韦,他总结出了能够全面描述电磁现象的基本理论,即麦克斯韦方程组。这一理论预言了电磁波,随后即为赫兹的实验所证实。原来独立发展的光学,至此归结为可见频段的电磁波的研究,从而纳入了电磁学的范围。探索和研究宽广的电磁波谱,从无线电波到微波与厘米波,从红外光、可见光到紫外光,从 X 射线到 γ 射线,一直持续到 20 世纪。

对热现象的研究导致 19 世纪中叶热力学的建立。其第一定律就是能量守恒定律,适用于任何宏观与微观过程,其有效性遍及物理学和整个自然科学;其第二定律就是熵恒增定律,确定了不可逆过程中的时间之矢。对热现象在微观层次上进行探究,导致了分子动理学和经典统计物理学的问世,麦克斯韦、玻尔兹曼

与吉布斯对它作出了重要贡献。这是在物理学中首次明确地引入了微观粒子(分子与原子)的概念。

应该强调指出,经典物理学已经孕育出一系列工程技术:建立在经典力学基础上的有机械工程、土木建筑工程和航空航天技术;建立在经典电磁学基础上的有电机工程、无线电工程和电子工程;建立在热力学基础上的有动力工程和工程热物理等。经典物理学也促进了其他自然科学的发展,如经典力学之于天体力学,热力学与统计力学之于物理化学等。

在20世纪初物理学出现了两大突破,即相对论与量子论。由于迈克尔逊与莫雷的精确测量不能发现地球的运动对光速的影响,1905年爱因斯坦提出了狭义相对论,指出了一切惯性参考系应具相同的物理规律,肯定了经典电磁学的规律对于一切惯性参考系都有效,引入了相对论力学来处理高速运动的问题,也更新了人们对时空的概念并揭示新的质能关系。1916年他基于惯性质量与引力质量等同的实验事实,提出了广义相对论。这是引力的几何理论,将引力和时空曲率相联系,从而提供了处理强引力场力学问题的有效方法。相对论弥补了经典物理学的一些漏洞,也为处理大尺度的天体和宇宙问题提供了合适的理论框架。

在19、20世纪之交,由于黑体辐射与光电效应的实验结果与经典物理学有明显矛盾,普朗克与爱因斯坦提出了初步的量子论。1913年玻尔提出了量子论的原子模型来解释氢光谱线系的经验规律。随后德布罗意提出粒子与波动二象性的概念。1925年海森伯与薛定谔表述了量子力学,给出了统一描述微观粒子行为的基本理论。量子力学问世之后,科学家用它来较全面地解决原子结构与分子结构问题,显示了它具有非凡的解决问题的能力。另一方面,量子力学也提供了理解化学周期表的物理基础,进而发展了量子化学和化学物理,进一步沟通了物理学和化学两大学科。1928年狄拉克表述了(狭义)相对论的量子力学,到20世纪中叶量子电动力学开花结果,成功地从微观上来处理电磁相互作用问题。

从20世纪之初到20世纪40年代,从放射性的研究逐步开拓成以原子核结构与其反应为主要内容的原子核物理学。核裂变与核聚变的发现和应用创建了全新的原子能技术。加速器的能量一再提高,促进了以研究基本粒子为对象的高能物理学的发展。大量基本粒子(包括各种类型的轻子、夸克与中间玻色子)被发现或推证,对它们进行测量、分类并理顺其关系,从而得出了粒子物理的标准模型(包括强子的夸克模型、量子色动力学与弱电磁互作用的统一理论)。迄今为止,此模型未遇反例,成为20世纪后半叶物理学的重大成果之一。当前面临的挑战在于如何超越标准模型的框架,扩大统一场论和对称性的范围,以期将量子力学和广义相对论相融合起来。

20世纪也是天体物理学极其活跃的时代。现代天文学的视野开阔,观测手段先进,因而可以将星体、星系和宇宙视为无比庞大的实验用来甄别物理学的基础理论。一些观测的结果已可对宇宙演化模型提供若干制约。目前获得学界认可的是宇宙学标准模型,是从大爆炸的高能态开始的。这样一来,就将高能粒子物理学和早期宇宙联系在一起,标志了微观与宏观的两个极端却迂回地合二为一了。

原子与分子物理在20世纪50、60年代出现了新的转机。受激发射在微波和光波频段先后得到了实现,从而导致激光器的发明,开创有重大应用前景的激光技术,同时也使光学和原子与分子物理学焕发出新的生命力。

在20世纪30年代将量子力学与统计物理应用于固体中的电子和原子,创建了固体物理学。电子在周期晶格中传播导致了固体的能带理论,格波在周期晶格中传播导致了晶格动力学,通过实验和理论的研究得以确立。1947年晶体管的发明就是固体物理学对技术的重大贡献,导致了电子学技术的重大革命,成为当今信息技术的基础。电子间的相互作用引起了铁磁性和超导电性,其探讨既具实际意义又有理论价值,使理论进入了多体问题物理学的领域。另一方面研究对象也越出常规的晶体,准晶、玻璃、液晶、胶体、聚合物、生物聚合物等,都进入了视野。相应地固体物理学也不动声色地转化为凝聚态物理学。凝聚态物理

学与材料科学密切相关,也成为发展新型电子学(微电子学、纳米电子学、磁电子学、超导电子学等)和光子学的基础。

经典物理学在20世纪亦萌发出一些新枝,如相变与临界现象以及非线性动力学(远离平衡态的失稳、图像形成、分形、混沌与湍流等),将为进一步理解复杂性这一疑难问题铺路架桥,也将促进物理学与化学、生物学、地学等相邻学科的相互交叉和渗透。可以说,物理学已成为自然科学、技术科学和工程科学的基础。

Mechanics
力 学

力学 mechanics 力学的研究对象是机械运动,即宏观物体之间或物体各部分之间相对位置随时间的变化,以及物体间相互作用与由此引起的物体运动状态变化所遵从的规律。从运动的形态来分,可以把力学分为静力学(statics)、运动学(kinematics)和动力学(dynamics)等几部分。从研究的对象来分,有质点力学、质点组力学、刚体力学、连续介质力学。当前,单独使用“力学”一词时,一般是指牛顿力学(Newtonian mechanics)或经典力学(classical mechanics),它适用于物体速度远小于光速的情况。当物体速度接近光速时,牛顿力学不再适用,而必须用相对论力学(relativistic mechanics)。另一方面,在亚原子领域,则需用量子力学(quantum mechanics),或量子场理论(quantum field theory),简称量子场论。

一、静力学
Statics

静力学 statics 静力学研究力系的简化规律及物体处于平衡状态时所受外力应满足的条件。

力的平行四边形公理 axiom about parallelogram rule for forces superposition 作用在一个点上的两个力,其合力亦作用在该点上。合力的大小等于以该两力大小为边的平行四边形的对角线的长度,方向是由该点出发沿四边形对角线方向。若有多个力作用在一点上,可按此方法给出两力的合力,此合力再与第三力按同样方法给出三力的合力,按此方法,最终可给出总合力的大小与方向。

作用在刚体上同一点的两个力的平衡公理 axiom for equilibrium of two forces acting on a rigid body at same point 要使作用在刚体上同一点的两个力平衡,其充分与必要条件是此两力的大小相等,方向相反,并且作用在一条直线上,与作用点在作用线上的位置无关。力是一种滑移矢量。

平面交汇力系 planar crossed force system 处于同一平面内,且都通过平面内某一个点的 n 个力构成的力系叫平面交汇力系。

平面交汇力系的合力 resultant force of planar crossed force system 平面交汇力系的合力等于所有力的矢量和,合力的作用线通过该力系的交汇点,叫主矢量,即合力,$\boldsymbol{F}_{合力}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i$。在直角坐标系 XY 平面内的分量形式是

$$\boldsymbol{F}_{合力x}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{ix},\quad \boldsymbol{F}_{合力y}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{iy}$$

平面交汇力系的平衡 equilibrium of planar crossed force system 平面交汇力系平衡的充分必要条件是

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i=0$$

在直角坐标系 XY 平面内的分量形式是

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{ix}=0,\quad \sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{iy}=0$$

平衡时,该力系构成的力多边形是封闭的。

平面任意力系 planar force system 处于同一平面内的 n 个力构成的力系叫平面力系。作用在刚体上的平面力系可以简化为一主矢量和一个主矩。

主矢量是力系各力的矢量和:$\boldsymbol{F}_{主矢量}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i$。在直角坐标系 XY 平面内的分量形式是

$$\boldsymbol{F}_{主矢量x}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{ix},\ \boldsymbol{F}_{主矢量y}=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_{iy}$$

主矩是对任意选定的简化中心而言的。它是各力对该点的力矩之代数和:$\boldsymbol{M}_o=\sum_{i=1}^{n}m_o\boldsymbol{F}_i.\ d_i$,其中 $m_o\boldsymbol{F}_i$ 是第 i 个力对简化中心的力矩,大小为 $\pm F_i d_i$,正负号一般按右手螺旋法则决定。d_i 是第 i 个力 F_i 到简化中心点的力

臂。

平面任意力系的平衡 equilibrium of planar force system 作用在刚体上的任意平面力系达到平衡的充分必要条件有两个。一是主矢量等于零，$F_{主矢量}=\sum_{i=1}^{n}F_i=0$，在直角坐标系中的分量形式是

$$F_{主矢量x}=\sum_{i=1}^{n}F_{ix}=0$$

$$F_{主矢量y}=\sum_{i=1}^{n}F_{iy}=0$$

第二是主矩为零，

$$M_o=\sum_{i=1}^{n}m_o(F_i)=0$$

力系的简化 simplify of a force system 作用在同一点的力系总可以按平行四边形法则，简化为一个合力。作用在刚体上的力系，由于其作用点不同可以引起不同的力学效应。这种力系可以简化为对简化中心的主矢量（即合力）和一个力偶矩。前者就是力系在简化中心的合力 $F_{主矢量}=\sum_{i=1}^{n}F_i$。后者是力系对简化中心的主矩 $M_o=\sum_{i=1}^{n}m_o(F_i)$。

二、运动学
Kinematics

运动学 kinematics 运动学只讨论物体或物体各部分之间相对位置随时间变化的描述，而不涉及这些变化的原因。这实际上是一种以时间为背景的几何化的描述。

加减平衡力公理 axiom about adding and/or subtracting forces 从作用在刚体上的力系中加上（或减去）任一平衡力系都不改变该力系对刚体的作用。

直线 straight line 在欧几里得空间，两点之间距离的最短的连线就是直线。在直角坐标中，XY 平面内的直线可以用方程 $x=ay+b$ 来表示。一条直线完全由它的斜率 a 和截距 b 决定。在三维空间它可以表示为两个平面的交线，例如 $x=0$ 和 $y=0$，它代表的直线就是 z 轴。

曲线 curve 平面上的任一线段，若其上各点的斜率不同，则该线段就是曲线。三维空间的曲线上各点的曲率半径是有限的。

二次平面曲线 quadratic planar curve 也叫圆锥曲线（conic curve）。用二次代数方程表示的平面曲线叫二次平面曲线。这种曲线可以看做是一个平面和一圆锥体相交而得的曲线。故又称为圆锥曲线。在直角坐标系的 XY 平面内，二次平面曲线可以表示为 $ax^2+by^2=0$。在平面极坐标中（$\rho\ \varphi$），二次曲线的标准形式为

$$\rho=\frac{p}{1+\varepsilon\cos(\varphi+c)}$$

式中 p，c 和 ε 都是常数，分别是半通径，初位相和偏心率。

圆 circle 圆是二次平面曲线的一种。在某一平面中，距固定点距离不变的点的轨迹就是圆。在直角坐标系的 XY 平面内的圆，若以坐标原点为圆心，则可以用方程 $x^2+y^2=R^2$ 来表示。其中 R 就是圆的半径。在平面极坐标中，按照圆锥曲线的标准形式，圆的偏心率 ε 为零，因而圆方程 $\rho=$ 常数。这里 ρ 是动点的径向坐标。

抛物线 parabola 抛物线是二次平面曲线的一种。在直角坐标系的 XY 平面内，它的标准形式可写作 $y=ax^2+b$。其中 a 和 b 是两个常数。在平面极坐标中，按照二次平面曲线的标准形式（见二次平面曲线条），当偏心率 $\varepsilon=1$ 时，它就是抛物线，$\rho=\frac{p}{1+\cos(\varphi+c)}$。

双曲线 hyperbola 双曲线是二次平面曲线的一种。在直角坐标系的 XY 平面中可写成 $xy=c$。在平面极坐标中，按照二次曲线的标准形式（见“二次曲线”条），当偏心率 $\varepsilon>1$ 时，它就是双曲线的一支，$\rho=\frac{p}{1+\varepsilon\cos(\varphi+c)}$，由对称性可得双曲线的另一支。

椭圆 ellipse 椭圆是二次平面曲线的一种，在直角坐标系的 XY 平面内，可表示成 $\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}=1$。其中 a 和 b 分别是椭圆的长半轴和短半轴。在平面极坐标中，按照二次平面曲线的标

准形式(见“二次曲线”条),当偏心率 $\varepsilon<1$ 时,就是椭圆,$\rho=\dfrac{p}{1+\varepsilon\cos(\varphi+c)}$。

轨道 trajectory; orbit 物体在运动过程中所经空间各点的连线叫轨道。它可以用参数方程 $x=x(t)$,$y=y(t)$,$z=z(t)$表示。其中 t 是时间或其他任意参数。

抛体运动 projectile motion 在地球表面附近不大的范围内,地球的引力可以看做是常数,一般用重力加速度 g 来表示。物体在重力场的作用下的运动叫做抛体运动,当一个质量为 m 的质点在 $y=0$ 的平面内以一定的初速度 $\boldsymbol{v}_0$(矢量)抛出后,在直角坐标的 XY 平面内,其运动方程可写成

$$x=(v_0\cos\alpha)t+x_0$$

$$z=(v_0\sin\alpha)t-\frac{1}{2}gt^2+z_0。$$

其中 x_0,z_0 是抛射体的抛出位置。z 轴取为 $(-g)$方向,α 是 $\boldsymbol{v}_0$ 和 x 轴的夹角(通常叫仰角)。

抛体运动的运动轨迹方程是

$$z=x\tan\alpha-\frac{g}{2v_0^2\cos^2\alpha}x^2。$$

速降线 brachistochrone problem 历史上,这是 1696 年伯努利首先得到解的一个二维变分问题。他讨论的是在铅直平面内,质点在重力作用下从静止出发,由一点 $A(x_1,y_1)$到另一点 $B(x_2,y_2)$所需时间最少的路径(即速降线)。在直角坐标系中,质点在重力作用下由 A 点自由下滑到 B 点所需的时间可表示为

$$T[y(x)]=\int_B^A\frac{\sqrt{1+y'^2}}{\sqrt{2gy}}\mathrm{d}x$$

由 $\delta T[y(x)]=0$ 可得解的参数方程为 $x=a(1-\cos\theta)$,$y=a(\theta+\sin\theta)$。a 是积分常数,θ 是参数。该方程所代表的曲线也叫旋轮线(cycloid)。是平面曲线的一种。

测地线 geodesic 曲面上任意两点之间的最短距离叫测地线。

球面上的测地线 geodesic on a sphere 球面上的测地线是指球面上任意两点之间距离最短的连线。球面上任两点 1 和 2 之间的距离的积分形式为

$$s=\rho\int_1^2\left[\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}\varphi}\right)^2+\sin^2\theta\right]^{1/2}\mathrm{d}\varphi$$

由上式的变分为零,即 $\delta s=0$,可以得到该测地线的球坐标表示式:

$$\cot\theta=\beta\sin(\phi-\alpha)。$$

其中 $\beta^2=(1-a^2)/a^2$,a 和 α 都是积分常数。由第二类欧拉方程可得

$$a=(\theta'^2+\sin^2\theta)^{1/2}-\theta'\frac{\partial}{\partial\theta'}(\theta'^2+\sin^2\theta)^{1/2}。$$

在直角坐标的 XY 平面内,上述方程可以表示为:$Ay+Bx=z$。其中 $A=\beta\cos\alpha$,$B=\beta\sin\alpha$。可见球面上的测地线就是过球心的平面和球面的交线,即该球面上的大圆。

参考系 reference frame 物体的运动总是相对于另一些选定的参考物而言的,人们研究物体运动时所选定的参考物体(或彼此不作相对运动的物体群)称为参考系,也叫参照系。

坐标系 coordinates system 为了能定量地表示物体在各个时刻相对于选定的参考系的位置,就必须要选择适当的坐标系。最常用的坐标系是直角坐标系(rectangular coordinates system),此外还有用于描写在平面内运动的平面极坐标系(planar polar coordinates system),以及柱坐标系(cylindrical coordinates system),球坐标系(spherical coordinates system),自然坐标系(natural coordinates system)及曲线坐标系(curve coordinates system)等。

直角坐标系 rectangular coordinates system 又叫笛卡儿坐标系(Cartesian coordinates system),它由三根相互垂直的坐标轴构成。任一矢量可以用该矢量在直角坐标中的分量,即该矢量在各坐标轴上的投影来表示。例如位置矢径 $\boldsymbol{r}=x\boldsymbol{i}+y\boldsymbol{j}+z\boldsymbol{k}$ 其中 x、y、z 就是位置矢量在各坐标轴上的投影,$\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{k}$ 分别是各坐标轴的单位矢量。它在空间各点是相同的。

平面极坐标系 planar polar coordinates system 平面极坐标系由极点和从极点出发的极轴构成。任一矢量 $\boldsymbol{A}$ 可用它在极轴方向和垂直于极轴方向的投影,即径向分量 A_ρ 和横向分量 A_ϕ 来表示。

$$\boldsymbol{A}=A_\rho\rho_0+A_\phi\varphi_0$$

其中 ρ_0 和 φ_0 分别是径向和横向单位矢量。值得注意的是这些单位矢量的方向在不同的地点是不同的。

柱坐标系 cylindrical polar coordinates system 对于三维问题,可以在平面极坐标系的基础上加一个垂直于平面极坐标所在平面的 z 轴构成柱坐标系。任一矢量 $\boldsymbol{A}$ 可用它在极轴方向和垂直于极轴方向的投影,即径向分量 A_ρ 和横向分量 A_θ 加上 z 轴方向的分量 A_z 的矢量和来表示:

$$\boldsymbol{A} = A_\rho \rho_0 + A_\theta \theta_0 + A_z \boldsymbol{k}$$

其中径向和横向单位矢量 ρ_0、θ_0 在不同的地点是不同的。z 轴方向的单位矢量 $\boldsymbol{k}$ 是固定不变的。

球(极)坐标系 spherical polar coordinates system 一个矢量 $\boldsymbol{A}$ 在球坐标中的三个分量分别是 A_ρ, A_θ, A_ϕ。它们分别表示矢量在径向,余纬度方向及经度方向的分量:

$$\boldsymbol{A} = A_\rho \rho_0 + A_\theta \theta_0 + A_\phi \phi_0$$

这里我们把 XY 平面选作赤道平面,z 选作极轴,θ 就是余纬度,ϕ 就是经度。球坐标系的所有单位矢量 ρ_0, θ_0, ϕ_0 都随不同地点而不同。

曲线坐标系 curve coordinates system 平面极坐标系,柱坐标系和球坐标系都是曲线坐标系。一般的曲线坐标系是由三组曲线组成。若在曲线簇的交点处相互垂直,则叫做正交曲线坐标系。

自然坐标系 natural coordinates system 在给定轨道的情况下,用自然坐标系表示物体的运动是比较方便的。在这种坐标系中,质点的速度大小由 $v=\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}$表示,其中 $\mathrm{d}s$ 是轨道曲线的元弧长,其方向是沿曲线在该点的切线方向(指向弧长增加的方向)。加速度可分解为切向加速度和法向加速度。前者 $a_\tau=\frac{\mathrm{d}^2 s}{\mathrm{d}t^2}$,后者 $a_n=\frac{v^2}{\rho}$。这里的 ρ 是轨道曲线在该点密切圆的半径。

曲率 curvature 曲率是表示曲线上某点弯曲程度的量。对平面曲线或三维空间中的曲线,一般用曲率半径来定量表示。曲率是曲率半径的倒数。对四维空间则要用高斯曲率,黎曼-克利斯托夫曲率张量(Riemann-Christoffel curvature tensor),曲率张量,曲率标量等来表示。

曲率圆 circle of curvature 通过曲线上的任一点和与之无限接近的两个相邻点作一圆,在极限情况下,这个圆就是该点的曲率圆。

曲率半径 curvature radius 为定量表示曲线在任一点处的弯曲程度,可用曲率或曲率半径来表示。曲率半径是曲线上一点的曲率圆的半径。对于平面曲线 $y=y(x)$,它可表示为

$$\rho = \frac{\left[1+\left(\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}\right)^2\right]^{3/2}}{\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}x^2}}。$$

一般来说,曲线上不同点的曲率半径是不同的。曲率半径越小,则曲线在该点的弯曲程度愈大。当某点曲率半径是无限大时,曲线在该点不再弯曲。

位置矢量,位矢 position vector 为表征一个质点在空间的位置,可以选择一个参考点作为原点,质点的位置可以用质点相对于该参考点的矢径来表示。这就是该质点的位置矢量,简称为位矢。

位移和位移矢量 displacement and displacement vector 质点位置的变化叫位移;质点位置矢量的变化叫位移矢量 $\Delta\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1$。

速率 speed 表征物体运动快慢的物理量叫速率,速率用一定时间间隔(单位时间)内物体走过的距离来表示。

平均速度 average velocity 在一定的时间间隔 Δt 内,位置矢径的平均变化率 $\boldsymbol{v}=\frac{\Delta\boldsymbol{r}}{\Delta t}$叫平均速度。

瞬时速度 instantaneous velocity 当平均速度的时间间隔趋向于零时,即 $\Delta t\to 0$ 时,平均速度的极限就是瞬时速度,数学表示为:

$$\boldsymbol{v} = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\Delta\boldsymbol{r}}{\Delta t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}。$$

它是一个矢量,方向沿其轨迹的切线方向,大小是$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$的绝对值$\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right|$。后者也叫瞬时速率。

瞬时速率 instantaneous speed 瞬时速度的大小叫瞬时速率,它可表示为

$$|v| = \lim |\Delta r|/\Delta t = \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}。$$

其中 $\mathrm{d}s$ 是该质点在 $\mathrm{d}t$ 时间内经过的轨道的圆弧长。

径向速度 radial velocity 在平面极坐标系中,质点速度沿矢径方向的分量叫径向速度。

横向速度 transverse velocity 在平面极坐标系中,质点速度在垂直于矢径方向的分量叫横向速度。

绝对速度 absolute velocity 一般来说,相对于静止坐标系的速度叫绝对速度。

相对速度 relative velocity 相对于静止坐标系有运动的坐标系叫运动坐标系。相对于运动坐标系的速度就叫相对速度。

牵连速度 transportation velocity 在有相对运动的两个坐标系中,运动坐标系中任一点或物体上与之相联的一点的速度叫牵连速度。

面积速度 area velocity 也叫**掠面速度**。运用平面极坐标描述质点在有心力作用下的运动时,经常用到面积速度的概念。它被定义为质点相对于力心的矢径在单位时间里扫过的面积。

加速度 acceleration 速度 $\boldsymbol{v}(t)$随时间的变化率$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$,叫做质点的(即时)加速度 $\boldsymbol{a}(t)$。由于速度是矢量而时间是标量,故速度的时间变化率也是矢量。所以加速度包括速度大小的变化和速度方向的变化。在自然坐标系中,可把加速度矢量表示为切向分量和法向分量两部分,分别称为切向加速度和法向加速度(见“自然坐标系”)。

平均加速度 average acceleration 平均加速度定义为在某一时间间隔 Δt 内,速度变化 $\Delta\boldsymbol{v}$ 和该时间间隔之比 $\bar{\boldsymbol{a}}=\frac{\Delta\boldsymbol{v}}{\Delta t}$

瞬时加速度 instantaneous acceleration 当平均加速度中的时间间隔趋向于零时,平均加速度就趋向于瞬时加速度,记作

$$\boldsymbol{a}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{\Delta\boldsymbol{v}}{\Delta t}=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}。$$

切向加速度 tangential acceleration 质点沿曲线运动时,它沿曲线切线方向的加速度叫切向加速度,

$a_t=\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}^2s}{\mathrm{d}t^2}$。它反映的是速度大小的变化,方向由曲线在该点的切线方向决定。

法向加速度 normal acceleration 对于平面曲线运动,和切向加速度相垂直的加速度叫法向加速度,它指向轨道曲线的凹侧,表示为 $a_n=\frac{v^2}{\rho}$,它反映速度方向变化的快慢。其中 ρ 是质点所在点该曲线的曲率半径。对于空间曲线运动,法向加速度是在曲线上一点的密接圆半径方向上,指向轨道曲线的凹侧,ρ 就是该点密接圆的半径。

绝对加速度 absolute acceleration 相对于静止坐标系的加速度叫绝对加速度。

牵连加速度 transportation acceleration 相对于静止坐标系有加速运动的运动坐标系中任一点或物体上与之相联的一点的加速度叫牵连加速度。

相对加速度 relative acceleration 相对于运动参照系的加速度叫相对加速度。

向心加速度 centripetal acceleration 质点作圆周运动时,沿半径方向指向圆心的加速度叫向心加速度。

三、动力学
Dynamics

动力学 dynamics 动力学研究物体运动状态变化与所受外界作用力之间的关系所遵从的规律。

牛顿力学 Newtonian mechanics 牛顿力学是1687年牛顿在他的《自然哲学的数理原理》(*Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*)中首先系统表述的。该书以八个定义和四个注释开始,接着是三条“公理或运动定理”和六个推论。此外还有关于万有引力定律的原始表述形式。这部划时代的巨著融合了前人的研究成果和他自己的创造,树立了力学发展史上的一个里程碑。

牛顿力学着眼于力的分析,把外界对物体运动的影响全部归结为力的作用。有时为区别于分析力学(analytical mechanics),也把牛顿力学叫做矢量力学(vector mechanics)。

牛顿第一定律　Newton first law or inertia law　每个物体将继续保持其静止或匀速直线运动状态，除非有力加于其上迫使它改变这种运动状态。这就是惯性定律的原始表述。

牛顿第二定律　Newton second law　物体在受到外力作用时，它所获得的加速度的大小与外力的大小成正比，其比例系数就是物体的质量。加速度的方向和外力的方向相同。

牛顿第三定律　Newton third law　两物体发生相互作用时，它们之间的作用力分别作用在这两个不同物体上，大小相等，方向相反，并在同一直线上。

万有引力定律　law of universal gravitation　质量分别是 M_1 和 M_2 的两个质点之间的引力为 $\boldsymbol{F}_{12}=-\frac{GM_1M_2}{r_{12}{}^3}\boldsymbol{r}_{12}$。其中 $\boldsymbol{F}_{12}$是 M_1 作用在 M_2 上的引力，$\boldsymbol{r}_{12}$是由 M_1 指向 M_2 的矢径。G 是万有引力常数，1986 年国际科学联盟理事会科技数据委员会(CODATA)推荐的数值为 $G=6.67259(85)\times10^{-11}\mathrm{m}^3/\mathrm{kg}\cdot\mathrm{s}^2$，不确定度为 128ppm(百万分之 128，即万分之 1.28)。

牛顿方程　Newton equations　按照牛顿第二定律，在惯性参照系中，质点在外力 $\boldsymbol{F}$ 作用下所获得的加速度矢量 $\boldsymbol{a}=\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}$与所受的力 $\boldsymbol{F}$ 有下列关系：$\boldsymbol{F}=m\boldsymbol{a}$。其中 m 是质点的质量，$\boldsymbol{a}$ 是质点某一时刻的瞬时加速度。这是一个矢量形式的二阶微分方程。在实际运算时，常选取不同的坐标系，方程的分量形式就会有不同的表示。以直角坐标系为例。其分量形式为：

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=F_x$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}=F_y$$

$$m\frac{\mathrm{d}^2z}{\mathrm{d}t^2}=F_z$$

如果作用力是已知的，这一组二阶微分方程加上初条件($t=0$ 时的位置和速度)，解方程后即可决定以后任何时刻的位置和运动状态。

伽利略相对性原理　Galilean principle of relativity　运动规律在伽利略变换下不变，称为伽利略不变性，或者称为伽利略相对性原理。

伽利略变换　Galilean transformation　质点在两个沿 x 轴相互做匀速直线运动的惯性系 K 和 K'中的时空坐标$(x,y,z;t)$;$(x',y',z';t')$之间有下列关系：

$$x'=x+vt,\ y'=y,$$
$$z'=z,\ t'=t+\tau。$$

其中 v 是 K'相对于 K 沿 x 轴的速度。这就是伽利略变换。很显然，牛顿方程的形式在伽利略变换下是不变的。所以说，牛顿方程是遵从伽利略相对性原理的。

马赫原理　Mach principle　1880 年，马赫在他的“Die Mechanik in ihrer Entwicklung”(发展中的力学)中提出一个重要假设，认为是地球和其他天体的质量的某种影响决定着参考系的性质。这一假设被称为马赫原理。它是对牛顿的绝对时空观的建设性的批判，对爱因斯坦创建狭义相对论产生了很大的影响。

经典力学　classical mechanics　经典力学是相对于相对论力学和量子力学而言的。人们把处理宏观物体在弱引力场中做低速运动的动力学和静力学理论叫做经典力学。

理论力学　theoretical mechanics　理论力学在处理力学问题时较系统地应用了数学方法，这是相对于普通物理力学而言的。

实验室参考系　laboratory reference frame　静止在实验室中的坐标系叫实验室参考系。

质心参考系　reference frame of center of masses　坐标原点置于系统质心上并随之一起运动的坐标系叫质心坐标系。

质量　mass　在《自然哲学数学原理》中，牛顿把质量当作第一定义给出：物质是用它的密度和体积一起来量度的。按其性质来分，物体的质量有两种定义：引力质量(gravitational mass)和惯性质量(inertial mass)。前者是能产生引力作用或受引力场作用的能力的量度，后者是它在任何外力作用下的惯性大小的量度。按照上述定义，这两种质量原则上应是完全不同的，但从牛顿开始直至目前为止的所有测量两者差别的实验都表明，在非常高的精度范围内(例如 10^{-13})，它们的数值是完全一样的。正是这一结果，导致爱因斯坦创立了广义相对论。

引力质量 gravitational mass 记作 m_g。按照牛顿万有引力定律，引力质量为 m_g 的物体与另一引力质量为 M_g 的物体之间引力的大小正比于 m_g 和 M_g 的乘积。因此引力质量既可以看做是产生引力的主体，又是在同一引力场中所受引力作用大小的量度。

惯性质量 inertial mass 按照牛顿第二定律，物体在同一外力作用下产生的加速度的大小反比于物体的质量，叫惯性质量。这里，惯性质量就是物体惯性大小的量度，完全是物体本身的内秉性质，与施力的主体的性质无关。

质点 particle 质点是一种理想化的模型。在研究机械运动时，若物体的形状和大小对运动的影响可以忽略，我们就可以把它看做是一个具有一定质量的几何点，称为质点。实际上，牛顿运动定律就是针对质点而言的。这是因为牛顿方程的加速度就是欧几里得几何中一个点的加速度，而一个空间点的位置由三个独立的参数来描述，即它具有 3 个自由度，在直角坐标中，可用 x, y, z 来表示，在柱坐标中，用 ρ, θ 和 z 来表示，在球坐标中由 r, θ 和 ϕ 来表示。

质点组 system of particles 由多个质点构成的力学系统叫质点组。实际上，任一力学系统都可以通过离散化的办法，即分割成 n 个足够小的小份，每一小份都看做是一个质点，就也可以当作质点组来处理。作为研究的对象，被选定的质点组以外的所有其他物体对组成该质点组的任一质点的作用力都叫做外力。质点组内各质点之间的相互作用力，叫做内力。如果没有受到约束条件的限制，N 个质点组成的质点组具有 $3N$ 个自由度，需要有 $3N$ 个独立变量才能完备地描述其空间位形（configuration）。

质心 center of masses 质心可以看做是质点组整体运动的代表点。它的位置由质点组各质点的质量及其分布决定。其位置矢量定义为：$\boldsymbol{r}_c \equiv \frac{1}{M}\sum m_i \boldsymbol{r}_i$。$M = \sum_i m_i$ 是质点组的总体质量。在直角坐标系中其分量形式为：

$$x_c \equiv \frac{1}{M}\sum_i m_i x_i \quad y_c \equiv \frac{1}{M}\sum_i m_i y_i$$

$$z_c \equiv \frac{1}{M}\sum_i m_i z_i。$$

其中 m_i 和 $\boldsymbol{r}_i$ 分别是第 i 个质点的质量和位矢，x_i、y_i、z_i 是它的位矢的分量。对于连续分布的物体，其质心也可以用类似的办法求得，只要把求和改成积分即可：

$$\boldsymbol{r}_c = \int \boldsymbol{r}\rho \mathrm{d}V/M。$$

其分量形式为

$$x_c = \int x\rho \mathrm{d}V/M, \quad y_c = \int y\rho \mathrm{d}V/M,$$

$$z_c = \int z\rho \mathrm{d}V/M。$$

式中 ρ 为密度，一般是空间坐标的函数。

动量中心系 center of momentum system 适当选取参考系，使得质点组在此参考系中总动量为零。这种参考系就叫做动量中心系或零动量系。

惯性参照系 inertial reference frame 凡惯性定律在其中能成立的参考系称为惯性参考系，简称惯性系。按照牛顿理论，真正的惯性系就是绝对空间，以及相对于它静止或做匀速直线运动的参考系。而按照马赫及后来的爱因斯坦理论，惯性系是由宇宙间的全部物质及其分布决定的。

力 force 物体之间的相互作用叫做力，它是引起受力作用的物体在惯性系中运动状态变化的原因。

力的叠加原理 superposition principle of force 如果有两个或两个以上的力作用在同一个质点上，则作用在该质点上的各个力造成的质点运动状态的总变化等于各个力按矢量相加得到的合力对该质点造成的运动状态的变化。

重力 gravity 地球表面附近的物体受到的地球引力作用，称为重力。它是万有引力在地球表面附近的一种表现。测量重力可以用静力学方法（static mechanical method），也可以用动力学方法。前者又可分为绝对测量（用弹簧秤）和相对测量（用天平）两种。用弹簧秤测得的是物体的重量，用天平称得的是物体的质量。

引力 gravitational force 引力是物体之间

的一种相互作用，牛顿把质量分别为 M_1 和 M_2 的两个质点之间的引力表示为 $\boldsymbol{F}_{12}=-\frac{GM_1M_2}{{r_{12}}^3}\boldsymbol{r}_{12}$ 其中比例系数 G 称为万有引力常数或引力常数。这就是著名的万有引力定律。$\boldsymbol{r}_{12}$是 M_2 相对于 M_1 的矢位。1986 年国际科学联盟理事会科技数据委员会（CODADT）推荐的数值为 $G=6.67259(85)\times 10^{-11}\mathrm{m^3/kg\cdot s^2}$。不确定度为 128ppm（百万分之 128，即万分之 1.28）。

恢复系数 restitution coefficient　在讨论两物体碰撞问题中，为了表示不同性质的碰撞，可用恢复系数来表示。它被定义为 $e=-\frac{v_1-v_2}{u_1-u_2}$。其中 v_1，u_1 和 v_2，u_2 分别是两个物体碰撞前后的速度。

支撑力 supporting force　物体静止地放置于某一面上时，将受到一个与重力方向相反的力，使之保持静止，这就是支撑力。它是约束力的一种。正是它的作用才使物体被限制在支撑面上。从本质上说，它是物体压在接触面上使之发生形变后产生的弹性反作用力。

胡克定律 Hooke law　在弹性极限范围内的一弹性体伸长或缩短时，其横截面两边的相互作用力 F 的大小正比于它长度的伸长量或缩短量 s，即 $F=-ks$。此定律被称为胡克定律。其中比例系数 k 叫做劲度系数或倔强系数，有时也叫弹性系数（elastic coefficient）。

位力定理 virial theorem　这是一个带有统计性质的定理。它可以表示为

$$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\left\langle\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{F}_i\cdot\boldsymbol{r}_i\right\rangle。$$

其中符号〈…〉表示对时间的平均。T 是总动能。$\boldsymbol{F}_i$ 和 $\boldsymbol{r}_i$ 分别是作用在第 i 个质点上的力和此质点的位矢。克劳修斯（Clausious）把上式右边叫做均位力，所以上式就叫做位力定理。当作用力具有势能 V 时，$\boldsymbol{F}_i=-\nabla_iV$，位力定理可改写为

$$\langle T\rangle=\frac{1}{2}\left\langle\sum_{i=1}^{n}\nabla_iV\cdot\boldsymbol{r}_i\right\rangle。$$

特别是对于平方反比有心力，上式简化为：$\langle T\rangle=-\frac{1}{2}\langle V\rangle$

有势力 potential force　可以表示成为某个标量的梯度的作用力叫有势力。这个标量就是该有势力的势。有势力是保守力。

耗散力 dissipative force　这种力（如摩擦力）做的功恒小于零，即 $\boldsymbol{f}_{ij}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{ij}\leqslant 0$（即对外做功），称为耗散力，是非保守力。

冲量 impulse　在一定的时间间隔内，力对时间的积分称为该力的冲量，$\boldsymbol{I}=\int\boldsymbol{F}\mathrm{d}t$。

压强 pressure or intensity of pressure　连续体中的正应力叫压强。一般来讲，它是空间坐标的函数。

非惯性参照系 non-inertial reference frame　当一个参照系相对于惯性参照系有加速运动（平动或转动）时，该参照系就是非惯性参照系。在非惯性系中，原始形式的牛顿定律不再成立。

惯性力 inertial force　若要在非惯性参照系中继续使用牛顿定律，就必须引入惯性力。惯性力是在非惯性系中存在的一种虚假的力，它不是物体之间的相互作用，而是代表某种运动状态。一般表示为

$$\boldsymbol{F}_{惯}=-m\boldsymbol{a}_{惯}。$$

其中 $\boldsymbol{a}_{惯}$ 是非惯性系相对于惯性系的加速度引起的牵连加速度，它包括惯性离心加速度，切向加速度和科里奥利加速度。

惯性离心力 inertial centrifugal force　它是惯性力的一种，来源于物体在有转动的坐标系中的向心加速度。可以写成下列矢量形式：$\boldsymbol{F}_{离心}=-m\omega\times(\omega\times\boldsymbol{r})$。其中 ω 和 $\boldsymbol{r}$ 分别表示转动参照系相对于惯性参照系的角速度矢量和质点在转动参照系中的位矢，m 是它的质量。

切向惯性力 tangential inertial force　相应于切向加速度的惯性力叫切向惯性力。它的大小为 $F_{切}=-m\frac{\mathrm{d}^2s}{\mathrm{d}t^2}$，方向与切线方向相反。

科里奥利力 Coriolis force　科里奥利力是一种惯性力。它存在于转动参照系中，并且只有当物体相对于转动参照系有相对运动速度，而且该速度不与转动角速度平行时才存在。

一般可写成

$$F_c = -2ma_c = -2m\omega \times v$$

引潮力 tide force 地-月系统在它们之间引力作用下围绕共同的质心旋转,引潮力是地球表面各地的海水所受月球的有效引力即"真实引力",与在地心参照系中的"惯性离心力"之和。后者由地心的离心加速度决定。

动量 momentum 也叫线动量(linear momentum)质点的动量定义为其质量和速度的乘积:$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$。质点组的动量是每个质点的动量的矢量和:

$$\boldsymbol{P} = \sum m_i \boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{P}_c$$

按照质心的定义,它等于质心的动量 $\boldsymbol{P}_c = M\boldsymbol{v}_c$。其中 $M = \sum m_i$ 是质点组的总质量。

动量定理 theorem of momentum 在一段时间内,物体动量的变化量,等于在此时间间隔内作用在该物体上力的冲量的矢量和:

$$m(\boldsymbol{V}_f - \boldsymbol{V}_i) = m\int_{t_i}^{t_f} \boldsymbol{F} \mathrm{d}t$$

动量守恒定理 conservation theorem of momentum 若在一段时间间隔内,作用在物体上的力的冲量或其分量为零,则该物体的动量或相应的分量保持不变。

角动量 angular momentum 质点的角动量定义为 $\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$。质点组的角动量定义为组成质点组的各质点的角动量之和:$\boldsymbol{J} \equiv \sum_i \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{p}_i$。刚体角动量可写成 $J_\alpha = \sum_{\beta=1}^{3} I_{\alpha\beta}\omega_\beta$。其中 $I_{\alpha\beta}$ 和 ω_β 分别是刚体的转动惯量张量的元素和角速度的分量。值得注意的是转动惯量张量各元素在空间坐标系中是随时间而变的,而在与刚体一起运动的本体坐标系中则是与时间无关的张量。

角动量定理 theorem of angular momentum 在惯性坐标系中,质点角动量随时间的变化率等于作用在其上的外力矩:$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{M}$。其中 $\boldsymbol{M} = \sum_i \boldsymbol{r}_i \times \boldsymbol{F}_i$,对质点组来说,只要把角动量和外力矩理解为质点组的总角动量和总外力矩即可。对于刚体来说上述角动量定理的形式依然成立,但当角动量是在本体坐标系中表示出来时,应改写为 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{J}}{\mathrm{d}t} = -\omega \times \boldsymbol{J} + \boldsymbol{M}$。这里等式左边对时间的微商是在本体坐标系中进行的(叫本地微商)。

角动量守恒定理 conservation theorem of angular momentum 当作用在质点、质点组或刚体上的总力矩为零时,质点、质点组或刚体的总角动量不随时间而变,即有角动量守恒定律。

力矩 moment of force or torque 作用在质点上的力 $\boldsymbol{F}$ 相对于某一特定点的力矩定义为 $\boldsymbol{M} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{F}$。其中 $\boldsymbol{r}$ 是质点相对于该特定点的矢径。

引力势 gravitational potential 引力是一种保守力,和引力相应的势函数称为引力势。在球坐标系中,引力势可写成 $V_g(r) = -K/r$。其中 $K = GM$。M 是产生引力的点质量,r 是引力场点到该点质量的距离。这里已经选择离点质量无限远处为势能零点。

电磁力 electromagnetic force 电场或磁场对电荷或电流的作用力称为电磁力,也叫洛伦兹力。$\boldsymbol{F} = q[\boldsymbol{E} + (\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})/c]$。式中 $\boldsymbol{F}$,$\boldsymbol{v}$,$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别表示带电质点受到的电磁力,质点的运动速度,电场强度和磁感应强度,q 是质点所带的电荷。

摩擦力 friction force 当相互接触的物体之间有相对运动趋势或相对运动时,它们之间就会有摩擦力。摩擦力分为干摩擦(dry friction)和湿摩擦(wet friction)两种,它们都是物体相互接触部分的分子之间复杂的相互作用的表现。有关摩擦力的起因和微观机理,尚有许多未知的领域有待进一步探讨。

干摩擦 dry friction 干摩擦也称外摩擦。它是固体表面之间的摩擦作用,又可分为静摩擦和滑动摩擦、滚动摩擦。

静摩擦力和静摩擦系数 static friction force and static friction coefficient 静摩擦力是当相互接触的两个物体有相对运动的趋势时发生的相互作用。这时的静摩擦力随作用在物体上的外力增大而变大,直至物体开始相对运动。在开始运动前的瞬间的静摩擦力叫最大

静摩擦力。实验证明，最大静摩擦力 $F_{摩擦}$的大小与接触面间的正压力 N 成正比：$F_{摩擦}=\mu N$，但与接触面大小无关，其方向与运动趋势的方向相反，比例系数 μ 叫静摩擦系数。

滑动摩擦 sliding friction 两相互接触的物体有相对运动时，它们之间的摩擦力的大小正比于接触面上的正压力，方向与运动方向相反。一般来说，摩擦系数与相对运动速度有关，且与接触面的材料性质也有关。

滚动摩擦和滚动摩擦系数 rolling friction and roll friction coefficient 实验证明滚动摩擦力也和正压力成正比，但摩擦系数不同。$F_{滚动摩擦}=\mu' N$，μ'称为滚动摩擦系数。

驱动力 driving force 在强迫振动问题中，除弹性力和摩擦力以外的外力叫做驱动力，它一般是时间的函数。

外力 external force 对质点组而言，该质点组以外的任何物体对它的作用都叫做外力。

内力 inertial force 质点组内部各质点之间的作用力叫做内力。

张力 tension 物体，比如绳子在受到拉伸时，其内部就会出现弹性力，它就是张力。

力或动量的叠加原理 superposition principle of force and/or momentum 作用在质点上的几个力或动量的总效果，等于按照平行四边形法则叠加后所得的合力或合动量的作用。

能量 energy 按照麦克斯韦(Maxwell)理论，物体所具有的能量是它能够对外做功的能力的量度。在力学范畴，主要是指机械能，包括动能和势能。在热学范畴表现为系统的内能。一般来说，各种运动形式的能量形式是不同的，它们之间可以发生转化，但总量不变。例如机械能可以通过某种过程全部转换成热能。另一方面，这种转化并不是完全可逆的。例如热能就不能完全变成机械能，而不留下不可消除的影响。

科尼希定理 Konig's theorem 质点组的总动能可以分成质心动能和质点组相对于质心的动能两部分，前者等于质心速度的平方和质点组总质量乘积的二分之一；后者等于每个质点相对于质心(平动)参照系的动能之和。推广到刚体，则刚体的动能等于质心动能加上刚体绕质心平动参照系的转动动能之和。

动能 kinetic energy 动能是机械能的一种，当质点以速度 v 运动时，相应的动能为 $E_k=\frac{1}{2}mv^2$。m 是质点的质量。对于质点组，每个质点的质量和速度可以不同，因而 $E_k=\sum\frac{1}{2}m_iv_i^2$。对于连续分布的物体有 $E_k=\frac{1}{2}\int\rho(x,y,z)v^2(x,y,z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$。其中 ρ 是密度，它一般是空间坐标的函数。

功 work 力(矢量)与作用在其上的质点的元位移矢量的标量积(即力沿位移方向的分量和该方向的元位移的乘积)就是该力做的元功，记作 $\mathrm{d}W=\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$。质点在力 F 作用下由 a 点运动到 b 点，所做的功是力的元功沿其运动路线的积分：

$$W=\int_a^b\mathrm{d}W=\int_a^b\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}。$$

实际计算时可以写成分量的形式：

$$W=\int_a^b(F_x\mathrm{d}x+F_y\mathrm{d}y+F_z\mathrm{d}z)$$

功率 power 单位时间内所做的功叫功率。功率 $P=\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t}=\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}$。其中 $\mathrm{d}W=\boldsymbol{F}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 是元功。

机械能 mechanical energy 机械能包括宏观的动能和势能两类。在运动过程中，它们之间可以相互转化，而不会消失，除非由于摩擦等耗散过程使之变成其他形式的能量。

势能 potential 由于保守力所做的功与路径无关，只与初终态的位置有关，所以人们总可以引进势能函数的概念。用 $V(p)$表示质点在 p 点的势能。更有意义的是质点初终态的势能差，定义为$-(V(f)-V(i))=W$。等式右边是质点沿任意路径由 i 到 f 时作用在质点上的力所做的功。为了给出任一点的势能，还必须确定计算势能的参考点。例如选择 i 点的势能为零，则 $V(i)=0$，$V(f)=-\int f\cos\theta\mathrm{d}s$。保守力做的功等于势能的减少。

重力势能 gravity potential 物体在地球表面附近重力场中具有的势能叫重力势能。若

取地球表面为重力势能的零点，则重力势能一般可写成 $V(h)=mgh$。其中 h 是物体距地球表面的高度。

引力势能 gravitational potential 引力势能是物体在引力中的势能。若以离引力源无限远处为势能零点，则引力势能可表示为 $V_g(r)=-G\frac{M_1M_2}{r_{12}}$。$M_1$ 和 M_2 是两个质点的质量，G 是万有引力常数，r_{12}是它们之间的距离。

静电势能 static electric potential 带电 q_2 的物体在电荷 q_1 的静电场中具有的势能叫静电势能。

$$V_e(r)=-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q_1q_2}{r_{12}}。$$

其中 $\varepsilon_0=8.85418782\times10^{-12}C^2/(N\cdot m^2)$是 SI 制时表示真空性质的一个比例系数称为真空介电常数。这里已经选择离 q_1 无限远处为势能的零点。

弹性势能 elastic potential 被拉伸或压缩的弹簧也可以做功，所以也有相应的势能。在弹性限度内，弹簧的弹性势能可以用弹簧的伸长量来表示：$E_p=\frac{1}{2}k(x-x_0)^2$。其中 x_0 是弹簧的平衡位置。

能量守恒 conservation of energy 能量守恒是自然界的基本原理之一。它是说自然界的各种能量可以通过某种过程相互转化，但总量不会减少或增加。

机械能守恒原理 conservation principle of machinery energy 在有势力场中运动的质点机械能包括动能和势能。在运动过程中，它们之间可以相互转化，但总量保持不变。这称为机械能守恒原理。以 T 和 V 表示动能和势能，机械能守恒原理就可以写成

$$T_f+V_f=T_i+V_i。$$

它表示初终态的机械能不变。

功能原理 principle of work and energy 当作用在质点上的力所做的功没有或不能用势能的变化来表示时，动能定理自然不能归结为机械能守恒原理。但根据能量守恒定律，可以得到系统机械能的变化等于非保守力做的功：$(T_2+V_2)-(T_1+V_1)=W_d$。其中 W_d 是质点从状态 1 变到状态 2 的过程中，作用在该质点上的非保守力做的功。

变质量物体动力学 dynamics of body with variable mass 这是一个质点组的动力学问题，但我们并不对质点组内所有质点的运动感兴趣，仅着重研究质量变化着的运动主体，例如火箭，雨滴等，而完全不考虑火箭喷射出的气体或雨滴上凝结的水蒸气的运动，因而是一个质量在不断变化的主体的运动问题。变质量物体的动力学问题的基本方程是密舍尔斯基方程。

密舍尔斯基方程 Miserski equation 密舍尔斯基方程实际上是计及离开运动主体的质点的反冲力的牛顿方程：$M\mathrm{d}v/\mathrm{d}t=(u-v)(\mathrm{d}M/\mathrm{d}t)+F$。其中 F 是外力，M 是任一时刻运动主体的质量，v 是其速度，u 是质量变化部分的绝对速度。我们可以把$(u-v)(\mathrm{d}M/\mathrm{d}t)$看做是变化着的质量对运动主体的作用力。若把它也当作是外力，则密舍尔斯基方程也可以看做是运动主体的动量定理。

齐奥尔科夫斯基第一问题 Ziorkovski first problem 质量为 M_0 的火箭在不受外力作用的情况下从静止出发，以一定的相对速率 v_r 将气体向后喷出，火箭本身作直线加速运动。求当所有的燃料都用完时的速率 v_s。若此时的火箭质量为 M_s，齐奥尔科夫斯基第一问题的解是

$$v_s=v_r\ln(M_0/M_s)。$$

齐奥尔科夫斯基第二问题 Ziorkovski second problem 齐奥尔科夫斯基第二问题是考虑到重力作用时的火箭运动。其他条件和齐奥尔科夫斯基第一问题相同。若火箭运动方向和重力方向相反，齐奥尔科夫斯基第二问题的解是 $v_s=v_r\ln(M_0/M_s)-gt_s$。其中 t_s 是火箭的喷射时间。

经典力学中的对称性 symmetry in classical mechanics 对称性是不可测量性或不可区分性的表现。在经典力学中，与时空有关的对称性直接和动力学守恒定律有关。

(1)空间绝对位置的不可测量性(unmeasured

of absolute position of space）　相应的变换是空间平移变换：$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}_0$。其中 $\boldsymbol{a}_0$ 是常矢量。若力学系统在此变换下不变，则有动量守恒。这是一种精确的对称性，表示空间不同位置是一样的，是不可区分的。

（2）空间绝对方向的不可测量性（unmeasured of absolute direction of space）　相应的变换是空间转动变换。以绕 z 轴转过 $\delta\phi$ 为例，该变换可以表示为 $x\to x'=x-y\delta\phi$，$y\to y'=y+x\delta\phi$，$z\to z'=z$。若力学系统在此变换下保持不变，则有角动量守恒，表示空间各个方向是相同的，不可区分的。

（3）绝对时间的不可测量性（unmeasured of absolute time）　相应的变换是 $t\to t'+\tau_0$，其中 τ_0 是常数。若力学系统在此变换下不变，则有能量守恒，表示时间是均匀的，与时间起点的选择无关。

（4）时间流动方向的不可测量性（unmeasured of direction of time flow）　相应的变换是 $t\to t'=-t$。若力学系统在此变换下是不变的，则称为具有时间反演不变。例如牛顿方程由于加速度是对时间的二阶导数，它在时间反演变换下是不变的。

刚体　rigid body　刚体是一种特殊的质点组，组成刚体的每一个质点都受到完整约束，使得刚体上任意两点之间的距离在运动过程中始终保持不变，因而它的自由度数只有 6 个。

刚体的平动　translation of rigid body　若刚体在运动过程中，固连在其上的任意一条直线始终保持与初始位置平行，则这种运动就叫做刚体的平动。刚体作平动运动时，其上的每一点的轨迹都完全相同，好像一个质点的运动，但质量是整个刚体的质量。

刚体绕固定轴的转动　rotation of rigid body about a fixed axis　简称为刚体的定轴转动。若刚体在运动过程中始终有两点保持不动，这种运动就叫做刚体的定轴的转动，两固定点间的连线就是转轴。刚体作定轴转动时，其上的每一点都在垂直于固定轴的平面内绕该轴作圆周运动，半径是该点到轴的距离。而且在相同的时间间隔内，不同半径转过的角度相同。刚体作定轴转动时的角速度是惟一的。这就是说，刚体作定轴转动时的自由度是 1。我们可以用惟一的角位移，角速度，角加速度来描述刚体的定轴转动。以转动角速度表示的动能为 $T=\frac{1}{2}I\omega^2$。其中 I 是刚体绕该轴的转动惯量，ω 是刚体的转动角速度，一般用正负号表示旋转的方向，以与轴成右手螺旋的旋转方向为正，反之为负。

转动惯量　moment of inertia　转动惯量是表示质点组相对于某轴转动时的惯量特性的物理量。质点组在绕固定轴转动时的转动惯量为 $I=\sum m_i r_i^2$。其中 m_i 和 r_i 是第 i 个质点的质量和到转轴的距离。对于连续分布的物体，可以用积分代替求和：$I=\int_V \rho r^2 \mathrm{d}v$。其中 ρ 是物体的密度，r 是体元到转轴的距离，积分遍及整个物体。

均匀细棒绕通过其质心，并垂直于棒身的轴的转动惯量　inertia of a homogeneous rod about an axis perpendicular to rod through the center of mass　$I=\frac{1}{12}mL$。其中 m 是棒的质量，L 是棒的长度。

均匀圆盘绕通过盘心，并垂直于盘面的轴的转动惯量　inertia of a homogeneous disk about an axis perpendicular to plane of disk through the center of masses　$I=\frac{1}{2}mR^2$。其中 m，R 分别是圆盘的质量和半径。

均匀圆球绕过球心的轴线的转动惯量　inertia of a homogeneous sphere about a axis through the center of sphere　$I=\frac{2}{5}mR^2$。其中 m 和 R 分别是该球的质量和半径。

平行轴定理　parallel axis theorem　刚体绕某一轴线的转动惯量 I 等于该刚体质心对该轴线的转动惯量 $I_0=mh^2$ 与刚体对通过质心的平行轴线的转动惯量 $I'=\int r^2\mathrm{d}m$ 之和：

$$I=I_0+I'。$$

其中 h 是质心到所说轴线的距离，$r(x,y,z)$ 是刚体中 x,y,z 处小质量元 $\mathrm{d}m=\rho\mathrm{d}v$ 到质心的距离。

垂直轴定理 perpendicular axis theorem 一个平面物体相对于过该物体中的任一点的互相垂直的三条轴线 $X_1X_2X_3$ 的转动惯量满足下列关系：$I_1=I_2+I_3$。I_i 是绕 X_i 轴旋转的转动惯量。

复摆 complex pendulum（也称**物理摆 physical pendulum**） 在重力作用下绕不通过质心的水平轴 o 点运动的刚体叫做复摆。和单摆相比，复摆有一定的质量分布，必须将它作为刚体在重力作用下的定轴转动来处理。当复摆绕该定轴作小振动时，它也是简谐运动。其振动周期 $T=2\pi\sqrt{\frac{l_0}{g}}$。其中 $l_0=\frac{I}{mh}$，叫做等值摆长（equivalence length of pendulum），式中 h 是刚体质心到 o 点的距离。其意义是，复摆作小振动时的周期和一个质量为刚体质量，摆长为 l_0 的单摆的振动周期相同。

复摆的一个重要性质是可倒逆性，可以用来精确测量重力加速度。为此，可以在刚体质心和轴线 o 的连线的延长线上找到另一点 o'，使得刚体绕该点作小振动时的周期和绕 o 时一样。据此可以得到 $h+\frac{I'}{mh}=h'+\frac{I'}{mh'}$。该方程有两个解：$h=h'$ 或 $h'=\frac{I'}{mh}$。前者表示 o 和 o' 对于质心是对称的。这就是所谓可倒逆性。利用第二个解，可以得到 o、o' 的距离正好是等值摆长 l_0。于是，只需找到对称的 o、o' 两点，并测出它们的距离 l_0，同时测出摆的周期即可算得重力加速度的准确值 $g=4\pi^2 l_0/T^2$，而不必测量刚体的转动惯量。

扭摆 torsion pendulum 扭摆由悬丝和与它相连的刚体组成。当悬丝随刚体转过一个角度 ϕ 时，悬丝将产生恢复力矩。在弹性限度范围内，扭转力矩和扭转角成正比：$M=-D\phi$。相应于扭转应变的弹性势能为 $U(\phi)=D\phi^2/2$。其中 D 是和切变模量有关的常数。当扭转角较小时，扭转角随时间按简谐规律变化。$\phi=\phi_0\cos(\omega t+\alpha)$。其中 $\omega=\sqrt{\frac{D}{I}}$，$I$ 是刚体的转动惯量。相应的周期 $T=2\pi\sqrt{\frac{I}{D}}$。通过测量其周期和材料的 D 即可算得刚体的转动惯量 $I=4\pi^2T^2D$。

刚体的平面平行运动 planar parallel motion of rigid body 若刚体在运动过程中各点的轨迹始终平行于某个固定平面，这种运动就叫刚体的平面平行运动。与此等价的表述是，作这种运动的刚体中垂直于该平面的任一直线在运动过程中始终保持垂直。按照第二种说法，研究刚体的平面平行运动可以用一个平面的运动来代表。其运动可以看成两个运动的叠加，一是质心的运动，一是刚体绕过质心并垂直于该平面的轴的转动。故有 3 个自由度。一般选择任一点作为基点，刚体的运动就可以表示成为基点的运动加上绕基点的转动两部分的叠加。但也可以把质心选为基点，刚体的总动能就可写成 $E=\frac{1}{2}mv_c^2+\frac{1}{2}I_c\omega^2$，其中 v_c 是质心的速度，I_c 是刚体过质心并垂直于平面的轴的转动惯量。由于质心被限制在平面内运动，故只有两个自由度，另一方面，ω 是刚体绕垂直于上述平面的转动角速度，只要一个角变量为描述即可。

刚体的定点转动 rotation of rigid body about a fixed point 若刚体在运动过程中始终有一个点保持不动（这个点可以是刚体上的，也可以不是刚体上的），这种运动就叫做刚体的定点转动。刚体作定点转动时有 3 个自由度。常用欧拉角作为描写刚体定点转动的动力学变量，这时刚体的定点转动就是进动，章动和自转三部分的叠加。（见“转动矩阵”）

刚体的转动 rotation of rigid body 刚体的转动是指刚体方位的变化。在任一瞬时，刚体的转动可以用适当的定轴转动来表示，该轴叫做瞬时转动轴。和平面平行运动不同的是刚体作一般转动时的转动轴的方向是变化的，因此要用六个独立变量才能完全描述这种运动。

角位移 angular displacement 刚体方位的变化表现为与它固连在一起的坐标轴相对于固定坐标系的方位角的变化。这种角度的变化叫角位移。

角位移矢量 angular displacement vector 描

写刚体方位变化的三个角位移一般不是矢量。只有当它们是无穷小的时候才构成角位移矢量。（见“转动矩阵”）

转动矩阵 rotation matrix 刚体上某一矢量在空间坐标系和本体坐标系中的关系可以用转动矩阵来表示 $x'=\boldsymbol{R}x$，例如绕 x_3 轴旋转 θ 角，转动矩阵可以写成

$$\boldsymbol{R}_3(\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta & 1\\ -\sin\theta & \cos\theta & 1\\ 1 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

容易看出，当 θ 是有限大小时，两次转动的结果和转动的次序有关：$R(\theta)R(\phi)\neq R(\phi)R(\theta)$。但是，对于无穷小转动，$\theta\rightarrow\delta\theta$，转动矩阵蜕化为

$$\boldsymbol{R}_3(\delta\theta)=\begin{pmatrix}1 & \delta\theta & 1\\ -\delta\theta & 1 & 1\\ 1 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

在这种情况下，两次无限小转动就是可交换的 $R(\delta\theta)R(\delta\phi)=R(\delta\phi)R(\delta\theta)$。所以，角速度是满足平行四边形法则，是矢量。而有限转动则是不可交换次序的，不是矢量。

角速度 angular velocity 刚体的角速度定义为它在无限小的时间间隔内角位移的无穷小变化：$\omega=\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}$。角速度的方向沿该刚体的瞬时旋转轴，按右手螺旋法则决定其正负。它是一个矢量，满足平行四边形法则。

进动 precession 和运动刚体固联在一起的本体坐标(x_1,x_2,x_3)的 x_1，x_2 平面绕空间坐标系(X,Y,Z)的 Z 轴的转动叫进动。描述进动的角度叫进动角。它是刚体 x_3 轴在 XY 平面上的投影和 X 轴的夹角。

规则进动 regular precession 刚体以确定的章动角作进动，叫做规则进动。

赝规则进动 pseudo-regular precession 对称陀螺在重力场中作快速自转时，由于重力的力矩作用而使它的对称轴偏离垂直方向，并获得进动角速度，同时造成刚体对称轴的周期性的章动。随着刚体自转角速度的增大，该章动速度迅速减小，同时进动减慢。实际上，对于足够快的陀螺，其章动几乎是观测不到的。Klein 和 Sommerfeld 把这种进动叫做赝规则进动。

非规则进动 non-regular precession 当作用在刚体上的力矩随时间变化时，例如地球受到太阳和月球的力矩，就会在进动的同时产生一定的章动，在天文上叫做天文章动(astronomical nutation)。这时的进动就是非规则进动。

节线 line of nodes 刚体本体坐标系 x_3 轴在空间坐标系 XY 平面上的投影就是节线。它也是章动角速度所绕的旋转轴线。

章动 nutation 刚体本体坐标的 x_1x_2 平面经进动后，绕节线的转动叫章动。所以章动角就是本体坐标系的第三轴和空间坐标系的 Z 轴的夹角。

自转 spin 刚体绕本体坐标系 x_3 轴的转动叫自转。该转动角就是自转角。

欧拉角 Eulerian angles 欧拉角是人们常用来描述刚体转动的动力学变量。它们分别是进动角(见进动条)、章动角(见章动条)和自转角(见自转条)。

沙尔定理 Chasle's theorem 沙尔定理是说，任一瞬时刚体的运动都可以看做是由基点的运动和刚体绕过基点的瞬时转动轴的转动组成。例如，以 O 为基点，刚体中任一点 i 的速度 $\boldsymbol{v}_i=\boldsymbol{v}_0+\omega\times\boldsymbol{r}_i$。其中 $\boldsymbol{v}_0$ 是基点的速度，ω 是刚体的角速度，$\boldsymbol{r}_i$ 是第 i 个质点相对于基点的矢径。

瞬时转动中心 instantaneous center of rotation 以 A 基点，刚体中任一点 P 的速度可以写成 $\boldsymbol{v}_P=\boldsymbol{v}_A+\omega\times(\boldsymbol{r}_P-\boldsymbol{r}_A)$。$\boldsymbol{r}_P$、$\boldsymbol{r}_A$ 分别是 P 点和基点的位置矢径。当 $\boldsymbol{v}_P=0$ 时，这个瞬时不动的点就是瞬时转动中心。这时，刚体的运动可以用绕瞬时转动中心的纯转动来表示。瞬时转动中心的位置 r_P 由下式决定：$0=\boldsymbol{v}_A+\omega\times(\boldsymbol{r}_P-\boldsymbol{r}_A)$。其中 $\boldsymbol{r}_A$ 是选定的基点的位置，$\boldsymbol{v}_A$ 是它的速度，ω 是刚体的角速度。$\boldsymbol{r}_P$ 就是瞬时转动中心的位置矢径。

在平面平行运动中，注意到基点速度始终和角速度方向垂直，所以瞬时转动中心相对于基点的位置由下列方程决定：$x=-\frac{\dot{y}_A}{\omega}$；$y=\frac{\dot{x}_A}{\omega}$。值得注意的是瞬时转动中心的加速度并不一定为零，以它为坐标原点，并随之运动的坐标系一般是非惯性坐标系。

瞬时转动轴 instantaneous axis of rotation 任一瞬时,刚体的转动都是围绕某一轴线进行的,但不同时刻轴的方向可以是不同的。这种某一瞬时保持不动的轴线就叫做瞬时转动轴。

刚体角动量和角速度的关系 relationship between angular velocity and angular momentum 在直角坐标系中,用转动惯量张量表示的任一角动量分量可写成:

$$J_\alpha = \sum_\beta I_{\alpha\beta}\omega_\beta, \quad \alpha,\beta = 1,2,3。$$

其中 $I_{\alpha\beta}$是转动惯量张量,ω_β 是角速度的分量。

刚体转动动能和角速度的关系 relationship between angular velocity and kinetic energy 在直角坐标系中,用转动惯量张量表示的动能可写成:$T_{\text{rot}} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\omega_\alpha I_{\alpha\beta}\omega_\beta$。其中 $I_{\alpha\beta}$ 是转动惯量张量,ω_α 和 ω_β 是角速度的分量。

并矢 dyadics 并矢是矩阵运算的另一种表示形式,一个并矢是有一定次序的一对矢量的一种表示,如并矢 $\boldsymbol{AB}$ 为:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{AB} = & A_xB_x ii + A_xB_y ij + A_xB_z ik \\ & + A_yB_x ji + A_yB_y jj + A_yB_z jk \\ & + A_zB_x ki + A_zB_y kj + A_zB_z kk\end{aligned}$$

它和另一个矢量 $\boldsymbol{C}$ 的乘积定义如下:

$$\boldsymbol{AB}\cdot\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C}),$$

$$\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{AB} = (\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{A})\boldsymbol{B}。$$

两个并矢的乘积定义为:

$$\boldsymbol{AB}:\boldsymbol{CD} = (\boldsymbol{C}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{D})。$$

要注意区分右乘和左乘的不同运算规则。

转动惯量张量 inertia tensor 刚体相对于某点的惯量特性需用张量来表示。这就是转动惯量张量 $\boldsymbol{I}$。

$$\boldsymbol{I} = \begin{pmatrix} I_{11} & -I_{12} & -I_{13} \\ -I_{21} & I_{22} & -I_{23} \\ -I_{31} & -I_{32} & I_{33}\end{pmatrix}$$

对于分立系统,转动惯量张量中的元素可表示为:

$$I_{\alpha\beta} = \sum m_i\left[\sum x_i^2\delta_{\alpha\beta} - x_{i\alpha}x_{i\beta}\right]。$$

对于连续分布的物体,转动惯量张量中的元素可表示为:

$$I_{\alpha\beta} = \int\rho\,\mathrm{d}v\left[(x^2+y^2+z^2)\delta_{\alpha\beta} - x_\alpha x_\beta\right]。$$

由转动惯量张量的定义可知,它是一个正定的对称张量。这里 ρ 为刚体密度。

惯量积 product of inertia 转动惯量张量中的非对角项叫惯量积。对于分立系统 $I_{\alpha\beta} = \sum m_i[-x_{i,\alpha}x_{i,\beta}]$,$\alpha\neq\beta$。当物质连续分布时 $I_{\alpha\beta} = \int\rho[-x_\alpha x_\beta]\,\mathrm{d}v$。如果取主轴坐标系,则惯量积都等于零。

惯量主轴和主轴坐标系 principal axis of inertia and coordinates of principal axes 由惯量椭球方程是正定的特性,总可以通过一个坐标变换,使惯量张量对角化,即使所有的惯量积都等于零。变换后的坐标系叫主轴坐标系。该坐标系的坐标轴叫惯量主轴。

转动惯量张量的本征值和主轴变换 eigenvalue of inertia tensor and principal axis transformation 转动惯量张量的本征值是由本征方程

$$\begin{pmatrix} I_{11} & -I_{12} & -I_{13} \\ -I_{21} & I_{22} & -I_{23} \\ -I_{31} & -I_{32} & I_{33}\end{pmatrix} = \lambda_1 I$$

所决定的 λ。其中 I 为 3×3 的单位矩阵。由此得到的变换叫主轴变换,因为这个变换可给出坐标主轴。

广义平行轴定理 generalized theorem for parallel axis 如果两个坐标原点之间由矢量 $\boldsymbol{a}$ 相联系。转动惯量张量在两个坐标系中的各分量有下列关系。$I_{ij} = I_{ij}^{(0)} - M[a^2\delta_{ij} - a_ia_j]$。这是定轴转动中的平行轴定理的推广,当 $i=j$ 时,它给出定轴转动时的平行轴定理。故称之为广义平行轴定理。

惯量椭球 inertia ellipsoid 惯量椭球是刚体相对于确定点的惯量特性的形象化表示。它是 1827 年法国科学家柯西首先引入的。惯量椭球由下列方程决定:

$$\begin{aligned} I = & I_{11}x^2 + I_{22}y^2 + I_{33}z^2 \\ & - 2I_{12}xy - 2I_{23}yz - 2I_{31}zx。\end{aligned}$$

其中 I 是刚体过一点任意方向的轴线的转动惯量。I_{ij}是该点的转动惯量张量的分量。在主轴坐标系中,因惯量积都等于零,相应的惯量椭球方程简化为 $I = I_{11}x^2 + I_{22}y^2 + I_{33}z^2$。惯量椭球以十分形象的方式给出刚体相对于

通过该点的一切直线的转动惯量。例如对于过该点的方向余弦为 $\cos\alpha$、$\cos\beta$ 和 $\cos\gamma$ 的轴线 $\boldsymbol{n}$,其转动惯量为

$$I_n = I_{11}\cos^2\alpha + I_{22}\cos^2\beta + I_{33}\cos^2\gamma - 2I_{12}\cos\alpha\cos\beta - 2I_{23}\cos\beta\cos\gamma - 2I_{31}\cos\gamma\cos\alpha。$$

回转半径 radius of gyration 刚体绕某轴的回转半径定义为 $R=\sqrt{\dfrac{I}{M}}$。其中 I 是刚体绕该轴的转动惯量,M 是刚体的质量。等价于把刚体看做是一个质量为 M 的质点以距离 R 绕该轴旋转。

回转效应 gyroscopic effect 陀螺仪在外力矩作用下产生的进动效应就是回转效应。

刚体定点运动的欧拉方程 Euler equations for rigid body with fixed point 刚体作定点运动时的欧拉方程是角动量定理在刚体定点运动时的表现。在本体坐标系中,可表示为

$$\dot{\boldsymbol{J}} + \omega \times \boldsymbol{J} = \boldsymbol{M}$$

其中 $\boldsymbol{J}$ 是刚体的角动量,$\boldsymbol{M}$ 是外力矩,ω 是刚体的瞬时角速度。方程的分量形式为:

$$\begin{aligned}
& I_{11}\dot\omega_1 - I_{12}\dot\omega_2 - I_{13}\dot\omega_3 \\
&= M_1 + I_{13}\omega_1\omega_2 - I_{12}\omega_1\omega_3 + I_{23}(\omega_2^2 - \omega_3^2) + (I_{22} - I_{33})\omega_2\omega_3 \\
& - I_{21}\dot\omega_1 + I_{22}\dot\omega_2 - I_{23}\dot\omega_3 \\
&= M_2 + I_{12}\omega_2\omega_3 - I_{23}\omega_2\omega_1 + I_{13}(\omega_3^2 - \omega_1^2) + (I_{33} - I_{11})\omega_1\omega_3 \\
& - I_{31}\dot\omega_1 - I_{32}\dot\omega_2 + I_{33}\dot\omega_3 \\
&= M_3 + I_{23}\omega_3\omega_1 - I_{13}\omega_3\omega_2 + I_{12}(\omega_1^2 - \omega_2^2) + (I_{11} - I_{22})\omega_1\omega_2
\end{aligned}$$

在本体主轴坐标系 $x_1x_2x_3$ 中可写成

$$\begin{aligned}
I_1\dot\omega_1 &= M_1 + (I_2 - I_3)\omega_2\omega_3 \\
I_2\dot\omega_2 &= M_2 + (I_3 - I_1)\omega_3\omega_1 \\
I_3\dot\omega_3 &= M_3 + (I_1 - I_2)\omega_1\omega_2
\end{aligned}$$

其中 I_1, I_2, I_3 是主转动惯量的三个分量。

刚体的拉格朗日函数 Lagrangian for rigid body 用欧拉角表示的拉格朗日函数是点的函数,若以质心为基点,可写成

$$L = \frac{1}{2}MV_c^2 + \frac{1}{2}\Big[(I_1 - I_2)(\dot\theta\cos\psi + \dot\varphi\sin\theta\sin\psi)^2 + I_2(\dot\theta + \dot\varphi\sin^2\theta)^2 + I_3(\dot\varphi\cos\theta + \dot\psi)^2\Big] - V(\phi,\theta,\psi)$$

其中 M 是刚体的质量,V_c 是质心速度,$V(\phi,\theta,\psi)$是刚体在外力场中的势能。

欧拉-班锁情况 Euler-Poinsat Case 这是无外力矩作用时对称陀螺的定点运动。由于对称性,可假定在本体主轴坐标系中,$I_1 = I_2 \neq I_3$。于是,欧拉方程简化为

$$\begin{aligned}
I_1\dot\omega_1 &= (I_1 - I_3)\omega_2\omega_3 \\
I_2\dot\omega_2 &= (I_3 - I_1)\omega_1\omega_3 \\
I_3\dot\omega_3 &= 0
\end{aligned}$$

该方程组的解析解为

$$\begin{aligned}
\omega_1 &= A\cos\left(\frac{I_3 - I_1}{I_1}\omega_3 t + \alpha\right) \\
\omega_2 &= A\sin\left(\frac{I_3 - I_1}{I_1}\omega_3 t + \alpha\right) \\
\omega_3 &= 常数
\end{aligned}$$

这表明,刚体的角速度矢量大小不变,绕其对称轴旋转,在空间中画出一个圆锥。旋转角速度为 $\dfrac{I_3 - I_1}{I_1}\omega_3$,相应的周期为 $\dfrac{2\pi}{\omega_3}\dfrac{I_1}{(I_3 - I_1)}$。

拉格朗日-泊松情况 Lagrange-Poisson case 这是对称重刚体的定点运动。它的拉格朗日函数为

$$L = \frac{1}{2}I_2(\dot\theta^2 + \dot\varphi^2\sin^2\theta) + \frac{1}{2}I_3(\dot\varphi\cos\theta + \dot\psi)^2 - mgh\cos\theta。$$

其中 h 是刚体质心到固定点的距离。

由于拉格朗日函数不显含 φ 和 ψ,同时外力是保守的,系统有三个运动积分

$$P_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial\dot\varphi} = (I_1\sin^2\theta + I_3\cos^2\theta)\dot\varphi + I_3\dot\psi\cos\theta = 常数,$$

$$P_\psi \equiv \frac{\partial L}{\partial\dot\psi} = I_3(\dot\psi + \dot\varphi\cos\theta) = 常数,$$

$$E = \frac{1}{2}I(\dot\theta + \dot\varphi\sin^2\theta) + \frac{1}{2}L_3^2/I_3 + mgh\cos\theta$$

以欧拉角及其导数表示的运动方程的第一积分是:

$$\dot{\psi}+\dot{\varphi}\cos\theta = L_3/I_3,$$

$$\frac{1}{2}I(\dot{\theta}^2+\dot{\varphi}^2\sin^2\theta)+\frac{1}{2}\frac{L_3^2}{I_3}+mgh\cos\theta = E,$$

$$I\dot{\varphi}\sin^2\theta+L_3\cos\theta = L_z。$$

其中 φ，θ 和 ψ 分别是进动角，章动角和自转角。

即使如此，由于方程是高度非线性的，所以一般不能得到解析解。对于某些特殊情况，可以通过等效势方法或特殊函数来讨论。按照系统的不同设置，可以对其运动作如下的讨论：

（1）当 $0<\theta<\pi/2$ 时，若 $P_\psi^2\geqslant 4mgI\cos\theta_0$ 或者 $\omega_3\geqslant\frac{2}{I_3}\sqrt{mghI\cos\theta_0}$。刚体以固定的章动角 θ_0 作稳定的进动。其进动可能有快速进动和慢速进动两种，可以分别表示为

$$\dot{\varphi}_{0(+)}\approx\frac{I_3\omega_3}{I\cos\theta_0}$$

$$\dot{\varphi}_{0(-)}\approx\frac{mgh}{I_3\omega_3}$$

（2）当 $\theta>\pi/2$ 时，不管自转角速度多大，都能有稳定的进动。但进动不仅有快慢之分，而且进动角速度还有正负之分，即进动方向可以不同。

（3）最一般情况下，刚体不仅有进动，同时还有章动发生。

对称陀螺 symmetric top 在主轴坐标系中，如果刚体的两个主转动惯量相等，例如 $I_1=I_2$ 这种刚体就叫做对称陀螺。

重对称陀螺 massive symmetric top 若在处理对称陀螺时要考虑它受到的重力矩的影响，这种陀螺的运动就叫做重对称陀螺问题（即拉格朗日-泊松情况）。

陀螺仪 gyroscope 陀螺仪是一种安装在常平架上的轴对称刚体，其对称轴的运动不受限制，同时重心保持稳定。由于没有引力力矩作用在重心上，当陀螺绕对称轴高速旋转时，其对称轴方向将保持原来的方向。因此可以用来指示某个参考方向，而不受载它的物体运动的影响。在陀螺仪中，陀螺的对称轴被限制在水平面内运动。对地球上的陀螺仪，由于地球的转动，陀螺仪所在平面相对于惯性空间将改变其方向。所以在约束力的作用下陀螺仪进动，即绕地轴作周期为一日的旋转。陀螺仪的对称轴趋于保持稳定，而安装得限制它的进动，结果是轴承有力作用在陀螺仪上。可以证明，这些约束力总是使陀螺仪的轴线和进动轴线一致，即指向地球转动方向。这样的安置使得陀螺仪可以用来指示子午面的方向。

刚体的平衡 equilibrium of rigid body 要使刚体达到平衡，不仅它受到的外力的总矢量必须等于零，而且该力系对任一点的总力矩（即主矩）也应为零。这样的力系叫零力系。

刚体平衡的稳定性 stability of equilibrium of rigid body 刚体平衡的稳定性是指刚体在某一力系作用下达到平衡后，若相对于某种小扰动的作用能恢复原来的平衡状态，则称该平衡是稳定的，否则是不稳定的。其判据是平衡时的势能是否是极小值。若是，则属稳定的；反之则是不稳定的。

刚体的动平衡 dynamical equilibrium of rigid body 刚体运动时，如果惯性离心力系中不仅其主矢为零，而且主矩也是零，则该刚体的运动不需外力的约束也能实现。刚体的这种运动状态称为动平衡状态。

刚体转动的稳定性 stability of rigid body rotation 刚体转动的稳定性是指当刚体作定点转动时，若它的转动轴稍稍偏离惯量主轴时，应考虑该偏离是否被限制在一定的范围里，即使没有外力矩作用。由于非对称刚体的三个主转动惯量互不相同，按照非对称刚体在无外力矩作用时作定点运动的欧拉方程，

$$I_1\dot{\omega}_1=(I_2-I_3)\omega_2\omega_3$$

$$I_2\dot{\omega}_2=(I_3-I_1)\omega_3\omega_1$$

$$I_3\dot{\omega}_3=(I_1-I_2)\omega_1\omega_2$$

若初始时刻刚体绕某一惯量主轴（例如 z_3 轴）以角速度 ω_3 旋转，而其他两个方向角速度很小（因为扰动），则它们的乘积是高级小量，ω_3 是定值。其他两个方向的运动方程分别是：

$$I_1\ddot{\omega}_1=-\frac{(I_3-I_1)(I_3-I_2)}{I_1I_2}\omega_3^2\omega_1$$

$$=0$$

$$I_1\ddot{\omega}_2=-\frac{(I_3-I_1)(I_3-I_2)}{I_1I_2}\omega_3^2\omega_2$$

$$=0$$

为不失一般性，可以假定 $I_3 > I_2 > I_1$，这时，上面两式的左边小于零，故方程是谐振方程，表示另两个方向上的振动不会无限增长，运动将是稳定的。反之，若 I_3 界于 I_2 和 I_1 之间，运动将是不稳定的。因为上面的两个方程将给出指数形式的解。总之，绕主转动惯量是最大或最小的惯量主轴的转动是稳定的，而绕转动惯量并非最大或最小的惯量主轴的转动是不稳定的。

极移 pole shift　对称刚体在无外力矩作用下运动（即欧拉-班锁情况）的一个重要例子是地球。地球的自转轴（叫天文地轴）并不与其对称轴（叫地理地轴）相合，因而前者绕后者旋转而描出一个圆锥。相应地，天文南北极均绕地理南北极描出一圆周。这种现象就叫做极移。极移的周期为 $\frac{2\pi}{\omega}\frac{I_1}{|I_3 - I_1|}$。其中地球自转周期为 $2\pi/\omega$ 是一个恒星日，而 $I_1/|I_3 - I_1|$ 按椭球计算约为 300，所以极移周期大约是 300 天，即 10 个月。但地球并不是严格的刚体，形状也不是准确的椭球，所以极移是沿一条复杂的曲线而不是圆周进动，实际的周期也不是 10 个月而是 14 个月。

不变平面 invariant plane　对于无外力矩作用的定点运动，因角动量和能量守恒，惯量椭球在它与瞬时转动轴交点处的切平面在空间中保持不变的取向，并且与定点保持不变的距离。因此这切平面是不变的，通常称为不变平面。

空间坐标系 space coordinates　固定在不动空间的坐标系叫空间坐标系。

本体坐标系 body coordinates　运动中，和刚体固连在一起的坐标系叫本体坐标系。

空间极迹 herpolhode　刚体的转动角速度矢量在固定空间画出的轨迹叫空间极迹。

本体极迹 polhode　刚体的转动角速度矢量在本体坐标系中画出的轨迹叫本体极迹。

有心力 central force　若质点所受的力的作用线始终通过某一固定点，这种力就称为有心力。该定点称为力心。

约化质量 reduced mass　两个质点相对于它们质心的运动动能可以写成：$T = \frac{1}{2}\frac{Mm}{M+m}v'^2$，其中 M 和 m 分别是两个质点的质量，v' 是两质点的相对运动的速度。这时，它们的运动动能相当于一个质量为 $\frac{Mm}{M+m}$ 的质点以速度 v' 运动时的动能，称 $\frac{Mm}{M+m}$ 为它们的约化质量或折合质量。

轨道方程 trajectory equation　在两体有心力问题中，由于角动量守恒，它们的运动始终在一与角动量垂直的平面上。常用平面极坐标来描述。两质点相对于质心的动能为 $T' = \frac{1}{2}\mu[\dot{\rho}^2 + \rho^2\dot{\varphi}^2]$，相应的轨道方程为：$\mathrm{d}\varphi = \frac{h\,\mathrm{d}\rho}{\rho^2\sqrt{\frac{2}{\mu[E - V(\rho)]}}}$。其中 E 是总能量，V 是有心力场的势函数。对于平方反比的引力来说，$V(\rho) = -k/\rho$，方程的解的一般形式为 $\rho = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}$。这是平面圆锥曲线的标准形式。所以在平方反比引力作用下运动的物体的轨迹一般是平面圆锥曲线。

偏心率 eccentricity　在二次曲线的标准形式中，偏心率为 $\varepsilon = \sqrt{1+\frac{2pE}{k}}$。其中，$E$ 是相对运动的总机械能，k 是有心力的势函数的比例常数。

当 $\varepsilon = 0$ 时，即 $E = -\frac{k}{2p}$，其轨道是圆；当 $\varepsilon < 1$ 时，即 $-\frac{k}{2p} < E < -\frac{k}{2p} < 0$，其轨道是椭圆；当 $\varepsilon = 1$ 时，即 $E = 0$ 时，轨道是抛物线；当 $\varepsilon > 1$ 时，即 $E > 0$ 时，轨道是双曲线（对称反映）。

比内公式 Binet's formula　比内公式是轨道微分方程的变形。它可以表示成为

$$h^2u^2\left(\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\varphi^2} + u\right) = -F(u)/m。$$

其中 $u = 1/\rho$，$h = \rho^2\dot{\varphi}$，h 是掠面速度的两倍，对有心力场是守恒量。

降阶比内公式 lower power Binet's formula　降阶比内公式是关于轨道的一阶微分方程。

$$\frac{1}{2}\mu h^2\left[\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\varphi}\right)^2 + u^2\right] + V\left(\frac{1}{u}\right) = E。$$

其中 μ 是折合质量，E 是总能量。

开普勒定律 Kepler Laws　经过对其老师第

谷积累的大量天文观测资料的长期研究，开普勒于1609到1618年间陆续发表了他的开普勒三定律。

第一定律：某些行星沿椭圆轨道绕太阳运行，太阳位于椭圆的一个焦点上（1609年）。

第二定律：对任一个行星来说，它相对于太阳的径矢在相等的时间内扫过的面积相等（1609年）。

第三定律：行星绕太阳运行的轨道的半长轴 a 的立方与它的周期的平方成正比，即 $a^3/T^2=K$（1618年）。这里的常量 K 与行星的性质无关，对太阳系来说是常量，叫开普勒常数（Kepler constant）。

开普勒方程 Kepler equation 在平方反比的引力作用下，当其相对运动机械能小于零时，相对矢径 ρ 作为时间 t 的隐函数表示的方程为

$$\frac{k}{a^{3/2}}t=\xi-\varepsilon\sin\xi$$

这就是天体力学中著名的开普勒方程。其中 $\xi=\arccos\frac{\rho-a}{a\varepsilon}$。

当相对运动机械能等于零时，开普勒方程为

$$t=\frac{h^3}{2k^4}\left(\xi+\frac{1}{3}\xi^3\right)+常数$$

当相对运动机械能大于零时，开普勒方程为

$$\frac{k}{a^{3/2}}t=\varepsilon\sinh\xi-\xi$$

上述方程中 $k^2=GM$，G 是万有引力常数，M 是太阳质量。$h=\rho^2\varphi$ 是运动守恒量。

人造地球卫星 satellite 人造地球卫星是指人类制造并发射，能环绕地球运行的物体。根据人造地球卫星的运行情况，可以分为环绕卫星，同步卫星，停泊卫星等。环绕卫星的运行轨道高于大气层的高度，因而不会因它和空气的摩擦作用而迅速烧毁，一般应高于地面120km以上。同步卫星是指它相对于地面某点的速度为零的卫星。当卫星和地心的连线的旋转角速度和地球的自转角速度一样时，它就是同步卫星。停泊卫星是指卫星进入最后轨道前临时停靠的某一圆轨道。以便在此轨道上调整卫星的运行姿态，再次发射后进入预定轨道。

第一宇宙速度 first cosmic velocity 在地球上发射卫星时，只有当发射的速度达到一定大小时，才能进入预定的轨道运转。我们把能使卫星进入绕地球的圆形轨道所需的速度，叫第一宇宙速度：

$$v_1=\sqrt{\frac{GM_{地球}}{R_{地球}}}。$$

第二宇宙速度 second cosmic velocity 能使卫星脱离地球引力作用从而离开地球进入太阳系所需的速度，叫第二宇宙速度，也叫逃逸速度（escape velocity）：

$$v_2=\sqrt{\frac{2GM_{地球}}{R_{地球}}}。$$

以这样大的速度从地球表面发射的卫星，将会脱离地球的引力作用。但在无限远处卫星速度将趋于零。它是以抛物线形轨道趋于无限远处。

同步卫星 synchronization satellite 为了使卫星处于地球上空某一固定位置，卫星应和地球以同一角速度转动。这样的卫星就叫同步卫星。

停泊轨道 standing orbit 发射卫星时，经常先将卫星送入围绕地球的某一圆轨道，然后在卫星到达某一点时再使它加速。上述圆形轨道就叫停泊轨道。

转移轨道 transition orbit 卫星从停泊轨道到达同步轨道之间的过渡轨道叫转移轨道。

霍夫曼转移 Hoffman transition 若停泊轨道、转移轨道和同步轨道三者在同一平面内，并相互相切，这样的转移叫做霍夫曼转移。

散射 scattering 具有一定动量的两个粒子，由远而近到达它们的作用范围内，发生动量交换，而后又由近而远相互分离，直至脱离它们的相互作用范围。这就是散射。

弹性散射 elastic scattering 若散射过程没有机械能损耗。这种散射就叫弹性散射。弹性散射前后粒子种类及数量都不变，但每个粒子的能量和动量可以不同。

非弹性散射 non-elastic scattering 若散射过程有机械能损耗，这种散射就叫非弹性散射。在非相对论情况下，非弹性散射前后粒子种类相同，但它们的运动状态不同。在相对论

情况下，非弹性散射前后的粒子不仅运动状态不同，数目和种类也可以不同。

散射角 scattering angle 散射过程中，两个粒子的相对矢径相对于入射粒子散射前的方向的偏转角叫散射角。由比内公式算得的是在质心坐标系中的散射角。在实验室坐标系中测得的散射角与之不同，它们之间有下列关系：

$$\cos\theta = -\frac{m}{M}\sin^2\Theta \pm \cos\Theta \cdot \sqrt{1-\frac{m^2}{M^2}\sin^2\Theta}$$

其中 θ 是质心坐标系中的散射角，Θ 是在实验室坐标系中的散射角。

碰撞参数 compact parameter 也称瞄准距离(aim distance)，是指假想两粒子之间不发生相互作用时，它们之间的最近距离 b。它和散射粒子的角动量 l，能量 E 有下列关系：$l=b\sqrt{2mE}$。微分散射截面便可以用碰撞参数 b 和散射角 θ 的微分形式来表示：

$$\sigma(\theta) = -\frac{b}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}。$$

碰撞参数是决定散射规律的重要参数之一。

散射截面 scattering cross section 又叫微分散射截面，定义为 $\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega \equiv \frac{\mathrm{d}N}{I}$。其中 I 是入射粒子束的强度，即单位时间内通过垂直于入射粒子速度方向的单位横截面积的粒子数。$\mathrm{d}N$ 是单位时间内 θ 方向单位立体角 $\mathrm{d}\Omega=\sin^2\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi$ 中接收到的（散射后的）粒子数。$\sigma(\theta)$就是微分散射截面(differential scattering cross section)。

卢瑟福散射截面 Rutherford's scattering cross section 卢瑟福用有心力理论讨论了带正电 Ze 的粒子在原子序数为 Z' 的原子核上的散射，得到微分散射截面公式如下：

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4}\left(\frac{ZZ'e^2}{2E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\frac{\theta}{4}}。$$

其中 E 是入射粒子的能量，θ 是质心坐标系中的散射角。在实验室坐标系中，可利用散射角在两种坐标系之间的变换关系得到相应的微分散射截面：

$$\sigma(\Theta) = \frac{1}{4}\left(\frac{ZZ'e^2}{2E}\right)^2\frac{\cos\Theta}{\sin^4\Theta}$$

反冲 recoil 当散射粒子的质量是有限的时候，在它受到入射粒子作用时，它的动量也要发生变化，其表现就叫做反冲。

周期性运动 periodic motion 在相等的时间里，重复进行的运动叫周期性运动。数学上，可以把周期运动表示为 $A(t+T)=A(t)$。其中 T 就是周期。

周期 period 周期性运动重复一次所需的时间叫周期，也是其对应的相位变化 2π 所需的时间，$T=\frac{2\pi}{\omega}$，ω 称循环频率或圆频率或角频率，$\omega=2\pi\nu$，ν 是频率。

振动 oscillation or vibration motion 如果周期性运动在空间上是来回往复的，则称为振动。

简谐振动 simple harmonic oscillation 周期性运动中，用单一频率的简谐函数描述的振动最为简单，其表示式是：$x=x_0\cos(\omega t+\phi)$，叫简谐振动，或简谐运动。其中 x_0 是该振动的振幅，是 x 随时间变化的最大值，$(\omega t+\phi)$是相位，ϕ 是初相位，ω 是角频率。当系统势能的表示式中只包含从平衡位置算起的位移的平方项，或其恢复力的表示式是位移的线性项，且力的方向与位移相反时，就会出现这种运动。

相位 phase 简谐运动的表示式中，物理量 $\omega t+\phi$ 叫做相位。相位没有量纲，单位是弧度。

初相位 initial phase 简谐运动的表示式中的物理量 ϕ 是 $t=0$ 时的相位，叫初相位。

振幅 amplitude 简谐运动的表示式中，系数 x_0 叫做振幅，表示该简谐运动的最大位移。

圆频率 circular frequency 简谐运动的表示式中物理量 ω 叫圆频率或角频率，它和振动频率 ν 之间有下列关系：$\omega=2\pi\nu$。单位是弧度/秒。

频率 frequency 周期的倒数叫频率，是单位时间间隔内相位变化 2π 的倍数。

同相 in phase 或者**完全相长的 constructive** 两个同频率的一维振动叠加时，若它们的初相位相同，则称它们是同相的，或完全相长的。

由它们合成的振动振幅是两者之和：$A_{合}:=A_1+A_2$。

反相 in opposition 或者相消的 **destructive** 两个同频率的一维振动叠加时，若它们的初相位相差 π。我们称这两个振动是反相的。其合成振动的振幅是两个振动振幅之差：$A_{合}=|A_1-A_2|$。

正交相差 quadrature 两个同频率的一维振动叠加时，若它们的初相位相差 $\pi/2$，则称这两个振动具有正交相差。其合成振幅是两振幅的平方和的方根：$A_{合}=\sqrt{A_1^2+A_2^2}$。

调制因子 modulating factor 两个频率不同的一维简谐振动叠加时，其合成运动有下列形式：$x_1+x_2=2A\cos\left(\frac{\omega_1-\omega_2}{2}t\right)\cos\left(\frac{\omega_1+\omega_2}{2}t\right)$ 其中 ω_1 和 ω_2 分别是两个简谐振动的角频率。合成振动随时间变化的快慢主要决定于第二项因子 $\cos\left(\frac{\omega_1+\omega_2}{2}t\right)$。合成振动的 $\cos\left(\frac{\omega_1-\omega_2}{2}t\right)$ 项叫做(振幅的)调制因子。

拍 beat 两上频率不同的一维简谐振动叠加时，合成运动的振幅随调制因子的变化而时强时弱，这种现象叫拍。

拍频 beating frequency 两个频率不同的一维简谐振动叠加时，其合成运动中 $\cos\left(\frac{\omega_1-\omega_2}{2}\right)t$ 项的 $\omega_1-\omega_2$ 被称为拍频。它就是振幅周期性变化的频率。

耦合摆 coupled pendulum 当两个或两个以上的单摆之间有相互作用时，这种系统叫耦合摆。

耦合振动 coupled oscillation 任何振动系统之间有相互作用时，该系统的振动就叫做耦合振动。

特征频率 characteristic frequency 耦合振动系统的振动可以看做是不同频率振动的叠加，每一种振动频率就是该系统的特征频率。

衰减振动 attenuating oscillation 也叫阻尼振动 damping oscillation，当振动系统不仅具有恢复力的作用，而且还有摩擦阻力作用时，它的振幅会因摩擦作用而逐步减小。这种振动就是衰减振动。以振子在黏性流体中的运动为例，阻尼振动的运动方程是 $m\ddot{x}=-kx-\eta\dot{x}$。其中 η 是流体作用在振子上的阻力系数。该方程的解为：$x=A\exp\{-\gamma t\}\cos(\omega t+\phi)$，$\omega^2=\omega_0^2-\gamma^2$，$\omega_0$ 是没有阻力时振子的振动频率，$\gamma=\eta/2m$ 是阻尼因子。从能量的观点来看，该振子的能量通过摩擦不停地以热能的形式转移到介质中，能量的变化满足方程：$\mathrm{d}E/\mathrm{d}t=-\eta\dot{x}^2$。能量的相对衰减速度(单位时间能量的衰减占总能量的比率)是：$-\frac{1}{\langle E\rangle}\frac{\mathrm{d}\langle E\rangle}{\mathrm{d}t}T=2\pi/Q$。$Q\equiv m\omega/\eta$ 叫品质因子，用来表示阻尼振动中能量衰减的速度。

临界阻尼振动 critically damped oscillation 对于有阻尼的振动系统，当阻尼力可以用运动速度的线性函数表示，即 $f_{阻尼}=-\eta\dot{x}$，且比例系数 η 等于两倍的物体质量和该系统无阻尼时的圆频率的乘积，即 $\eta=2m\omega_0$ 时，叫临界阻尼。这时，$x=(a+bt)e^{-\gamma t}$。系统已经不再振动，而是以指数形式趋向于零。

欠阻尼 lower damping 对于有阻尼的振动系统，当阻尼力可以用运动速度线性函数表示，即 $f_{阻尼}=-\eta\dot{x}$，且比例系数 η 小于两倍的物体质量和该系统无阻尼时的圆频率的乘积，即 $\eta<2m\omega_0$ 时，叫欠阻尼。这时，$x=Ae^{-\gamma t}\cos\left(\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t+\varphi\right)$。系统仍能振动，但振幅以指数形式随时间衰减。

过阻尼 overdamping 对于有阻尼的振动系统，当阻尼力可以用运动速度线性函数表示，即 $f=-\eta\dot{x}$，且比例系数 η 大于两倍的物体质量和该系统无阻尼时的圆频率的乘积，即 $\eta>2m\omega_0$时，叫过阻尼。

非线性振动 nonlinear oscillation 振动系统偏离平衡位置的距离较大时，它所受的恢复力不仅有偏离平衡位置距离的一次方的项，而且还有它的二次或更高的次方的幂的项。带有二次或二次方以上的作用力叫非线性力，在非线性力作用下的振动叫非线性振动。

线性化 linearization 系统在其平衡位置附近作小振动时，其势能函数可以在平衡位置作泰勒展开。若仅保留位移的平方项，相应的运动方程就是线性的。这种近似就是线性近似。

受迫振动 forced oscillations 在周期性的驱

动力作用下的振动叫受迫振动。其运动微分方程可写成：

$$m\ddot{x}+kx=F_0\cos\omega t$$

受迫阻尼振动　driven damping oscillation　振子在阻尼力和周期性驱动力的同时作用下的振动叫受迫阻尼振动。受迫阻尼振动的运动微分方程一般可以表示为：

$$m\ddot{x}=-kx-\eta\dot{x}+F_0\cos\omega t$$

其中 ω 是驱动力的频率，方程可简化为 $\ddot{x}=-\omega_0^2x-2\gamma\dot{x}+\frac{F_0}{m}\cos\omega t$。$\omega_0$ 是无阻尼时的谐振子振动圆频率。上述方程的解可写成：

$$x=\frac{F_0}{m}\frac{1}{\sqrt{(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\gamma^2\omega^2}}\times\cos\left(\omega t-\frac{\pi}{2}+\arctan\frac{\omega_0^2-\omega^2}{2\gamma\omega}\right)$$

共振　resonance　当有周期性的驱动力存在时，振动系统的振幅将会因驱动力不断地作功而变大，当驱动力的频率和系统的固有频率相同时，位移和速度的振幅将达到无穷大，这就是共振。若有阻尼力存在，振幅不会达到无穷大，但会出现很陡的尖峰，这取决于阻尼力的大小。

位移共振　displacement resonance　振子在阻尼力和驱动力作用下，由于周期性驱动力的作用，当它的频率和振子的固有频率及 γ 满足下列关系时，即当 $\omega^2=\omega_0^2-2\gamma^2$ 时，其振幅将会达到某个固定的极大值，$x=\frac{F_0}{k}\frac{\omega_0^2}{2\gamma\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}\cos\left[\omega t-\frac{\pi}{2}+\arctan(\gamma/\omega)\right]$ 这时，驱动力将发生相位滞后：$\Delta\phi=\phi_{位移}-\phi_{驱动}=-\pi/2$。

速度共振　velocity resonance　振子在阻尼力和周期性驱动力作用下其速度将按下列规律变化：

$$\dot{x}=\frac{F_0}{m}\frac{\omega}{\sqrt{(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\gamma^2\omega^2}}\cos\left(\omega t-\frac{\pi}{2}+\arctan\frac{\omega_0^2-\omega^2}{2\gamma\omega}\right)。$$

显然，当 $\omega=\omega_0$ 时发生速度共振，速度和周期性驱动力同相。这时的速度为：$\dot{x}=\frac{F_0}{k}\frac{\omega_0^2}{2\gamma}\cos\omega t$。其中 $\omega_0^2=\kappa/m$。

加速度共振　acceleration resonance　振子在阻尼力和周期性驱动力作用下，其加速度将按下列规律变化

$$\ddot{x}=\frac{F_0}{m}\frac{\omega_0^2}{\sqrt{(\omega^2-\omega_0^2)^2+4\gamma^2\omega^2}}\cos\left(\omega t-\frac{\pi}{2}+\arctan\frac{\omega_0^2-\omega^2}{2\gamma\omega}\right)。$$

加速度共振的条件是 $\omega=\frac{\omega_0^2}{\sqrt{\omega_0^2-2\gamma^2}}$。这时的相位差为 $\phi_{加速度}=\pi+\phi_{位移}$。这时的加速度

$$\ddot{x}=\frac{F_0}{k}\frac{\omega_0^2}{2\gamma\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}\times\cos\left(\omega t+\frac{\pi}{2}-\arctan\frac{\gamma}{\sqrt{\omega_0^2-2\gamma^2}}\right)。$$

相互垂直的两个不同频率的振动的合成　combination of two vibration perpendicular each other with different frequency　当两个互相垂直的简谐振动频率不同时，合成的轨迹与频率之比和两者的相位都有关系，图形一般比较复杂。但当两者的频率成整数比时，其轨迹是闭合的曲线，运动是周期性的，这就是利萨如图形(Lissajous figure)。

吸引子　attractors　吸引子是指非线性系统的下列状态：平衡点，极限环和准周期运动等。

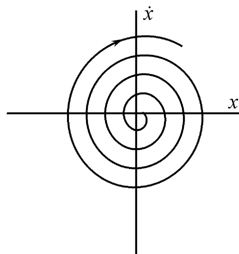
准周期运动　quasi-periodic motion　当两个相互垂直的简谐振动频率之比是无理数时，它们的合成运动将永远不再重复已走过的轨道。时间久了，它的轨迹将稠密地分布在由振幅限定的整个矩形面积内。这种在空间上是有限制的运动叫准周期运动。例如，$x(t)=a\cos(\omega t)+b\cos(\pi\omega t)$ 就是这样的情况。由于 π 是无理数，两个周期函数的周期是非公度的(noncommensurate)。由这个函数描述的运动就是准周期运动。

极限环　limit cycle　极限环是相空间中的一条轨道。它发生在例如如下方程描述的运动中，

$$\ddot{\theta}+\alpha\sin\theta=T+\gamma\dot{\theta}(1-\rho\dot{\theta}^2)$$

由于方程右边第二项与 $\dot{\theta}$ 的正负有关，相应

于相空间中的轨迹就趋向极限环。它把相空间分成两个区域,在不同的初条件下分别由该区域内外侧趋于该极限环。



极限环

波 wave 任何一个物理量,若它和某个独立变量(通常是时间)的关系正是某一特定时刻一个传播着的振动所具有的空间分布,则称该物理量是以波的形式运动。另一方面,波也可以看做是某种物理量的周期性变化的传播。这种变化状态既随时间、又随空间作周期性的变化。

横波 transversal wave 振动方向和传播方向相垂直的波叫横波。

纵波 longitudinal wave 振动方向和传播方向相一致的波叫纵波。

混合波 mixed wave 振动方向既有和传播方向一致的又有和传播方向相垂直的波叫混合波。

一维波 one dimensional wave 朝某一确定方向传播的波叫一维波。例如弦中的振动的传播。一维简谐波一般可以写成 $u(x,t)=A\cos(\omega t-kx+\phi)$。其中 k 为波矢。

色散 dispersion 色散最早是牛顿用棱镜把太阳光分成彩色光带而发现的一种现象。它是与波在介质中传播速度和波长有关的现象。现在它被用来泛指其他波速与波长有关的现象。

色散关系 dispersion relation 波动方程中角频率和波矢的关系叫色散关系。

色散曲线 dispersion curve 色散关系可用角频率随波矢变化的关系式表示:$\omega=\omega(k)$。由该式确定的曲线叫色散曲线。

二维波 two dimensional wave 在某个平面内传播的波叫做二维波,例如水面波。

三维波 three dimensional wave 朝空间不同方向传播的波叫做三维波。例如空气中的声波。其波矢是一个三维矢量。波动方程为 $u(\boldsymbol{r},t)=A\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t+\phi)$。

平面波 planar wave 波在传播过程中,其波前是平面的叫平面波。

球面波 spherical wave 波在传播过程中,其波前是球面的叫球面波。

柱面波 cylindrical wave 波在传播过程中,其波前是柱面的叫柱面波。

行波 travelling wave 向某一方向传播着的波叫行波。朝 x 轴方向传播的行波可表示为:$u(x,t)=A\cos(\omega t-kx)$这就是一维行波。若传播着的振动有三个方向,而且振动也是空间的,这种波就叫做三维行波。若波的传播方向是在某一平面内,这种波就叫做二维行波。

简谐波 simple harmonic wave 简谐波具有单一频率,是可以用来构造带有某种特定信息的波的基本分量。它可以用简谐函数来表示:$\boldsymbol{u}(x,t)=A\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\pm\omega t-\phi)$。一般它是一个传播三维振动的波。

波矢 wave vector 在简谐波的数学表示式中,$\boldsymbol{k}$ 就是波矢。它是个矢量,表示波的传播方向。其大小为 $k=\dfrac{2\pi}{\lambda}$,λ 是波长。

波数 wave number 波矢的大小叫波数。

波前 wave front 波的同相位各点构成的面叫波前。

波长 wave length 波的相位相差是 2π 的相邻两点空间的间隔叫波长。一般记作 λ。

波速 wave velocity 波的传播速度,一般是指波的相速度(phase velocity of wave)。定义为:

$$v_{\mathrm{p}}\equiv\frac{\Delta\omega}{\Delta\kappa}。$$

ω,κ 分别是圆频率和波矢。

波的群速度 group velocity of wave 波的群速度定义为 $v_{\mathrm{g}}\equiv\dfrac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$。

波的相速度 phase velocity of wave 波的相

速度定义为：$v_p \equiv \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$。

波包 wave packet 波包是以某个波矢为中心，各种不同波矢的波按不同振幅叠加构成的。若构成波包的诸波矢与其中心波矢 k_0 的偏离均不超过 Δk_0，且其振幅远小于波矢 k_0 所对应的振幅 $A(k_0)$，其叠加式可以写成 $\sum_{k=k_0-\Delta k_0}^{k_0+\Delta k_0} A(k)e^{i[kx-\omega(k)t]}$。这样构成的合成波的包络线便称为波包。

驻波 standing wave 当两列振幅和频率都相同，但传播方向相反的简谐波叠加时，合成波可以表为 $u(x,t)=2A\cos kx\cos\omega t$。其中 A 是它们的振幅，ω 是它们的角频率，k 是它们的波矢，上式表明，合成后各点都以角频率 ω 作简谐振动。但各处振幅不同。在 $|\cos kx|=1$ 处振幅最大，叫波腹(loop)。在 $\cos kx=0$ 处振幅最小，叫波节(node)。

线性波 linear wave 线性波是由线性波动方程描写的。对自由振动的传播过程，这种波没有能量损失。

非线性波 non-linear wave 描写非线性波的波动方程含有非线性项，例如有阻尼的波动方程中，应加上阻尼项 $\beta\frac{\partial u}{\partial t}$。则波动方程变为：$T\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\beta\frac{\partial u}{\partial t}=\rho\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$。其中 β 是阻尼力密度。当 β 是 u 的函数时，它就是非线性波。

孤波 solitary wave 1844 年，罗素(J. Scott Russell)首次报道了一种稳定脉冲的存在。以后称为孤波，他是在爱丁堡-戈拉斯高运河(Edinburg-Glasgow canal)上的一次经历中发现的。1895 年考特威格(Korteweg)和德伏瑞斯(de Vries)给出了一个浅水波方程(KdV)，为解析地研究这种波提供了一个理论基础。人们发现，这是一种非线性现象，广泛存在于物理学的各个领域，受到普遍关注。

波动方程 wave equation 在连续介质中，向空间各方向传播的波可用波动方程来描述：

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial z^2}-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial x^2}=0。$$

这是一个以速度 v 在空间传播的三维波。

声波 sonic wave 介质密度或压强变化的传播叫声波。

波射线 ray of wave 表明波动传播方向的线叫波射线。

调幅波 amplitude-modulated wave, AM wave 当两个频率和波长接近的方向相同的两列波在空间同一区域内传播时，它们的合成波可以写成 $u(kx-\omega t)=2A\cos(\Delta kx-\Delta\omega t)\cos(kx-\omega t)$。可见，合成波的振幅本身(混合波长的波包)也是一个波。这个波相对于合成波而言是缓变的，称此合成波为调幅波。

表面波 surface wave 在介质表面传播的波叫表面波。例如水面波。它和声波不同，其压强并不是因为密度而变化，而是因其表面的不平和曲率变化而引起的，振动的恢复力不是弹性力，而是重力和表面张力。液体表面波的相速度和群速度不同，相速度的一般表达式可以写成：$v_p=\left[\left(\frac{g\lambda}{2\pi}+\frac{2p\sigma}{\rho\lambda}\right)\tanh\frac{2\pi h}{\lambda}\right]^{1/2}$。其中 h 是水深，σ 是表面张力，λ 是波长。按照波长的不同，又可分为深水波和浅水波(或称重力波和毛细波)两种。当 $h\ll\lambda$ 时，群速度是 $v_g=\sqrt{gh}$。

重力波 gravitational wave 也叫**深水波 deep water wave** 当 $\lambda\gg\lambda_0$(对应于相速度极小的波长)，表面波的相速度为 $v_p=\sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}}$；群速度为 $v_g=v_p+k\frac{dv_p}{dk}=v_p/2$

浅水波 shallow water wave 也叫**毛细波 capillary wave** 浅水波是满足 $\lambda\ll\lambda_0$ 的情况，这时，它的相速度是 $v_p=\sqrt{\frac{2\pi\sigma}{\rho\lambda}}$，而群速度 $v_g=3v_p/2$。

波的能量密度 energy density of wave 对于一维横波，其能量密度是

$$\frac{1}{2}\rho\left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2+v^2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right]$$

波的能流 energy flow 对一维波而言，单位时间内通过某点的能量是张力 F_T 所做的功：

$$p=F_T\cdot\frac{\partial u}{\partial t}=\pm F_T\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 v。$$

其中 F_T 是弦中的张力。一维简谐波的功率为

$$P=\pm\rho A^2\omega^2\sin^2(kx-\omega t-\phi)v$$

波的功率 power of wave 波的功率 $P=\pm\rho A^2\omega^2\sin^2(kx-\omega t-\phi)$。

波的平均功率 average power of wave 波的平均功率定义为

$$\bar{P}=\frac{1}{T}\int_0^T P\mathrm{d}t=\pm\rho A^2\omega^2 v\propto A^2$$

波的强度 intensity of wave 波的强度是指波的平均能流密度,即单位面积上的平均能流密度。常以 I 表示波的强度,则 $I=\rho_0 v\omega^2 A^2$。例如对于声波,声强正比于其振幅的平方。其量纲应是[I]=MT^{-3}。

多普勒效应 Doppler effect 由于波在介质中的传播速度与波源相对于介质的速度无关,而与观测者观测到的波的振动频率与波源相对于观测者的速度有关。设波源和观测者相对于介质的速率分别是 v_s, v_o,波源发出频率为 ν_o 的波,则观测者接受到的波的频率为 $\nu=\frac{v_p-v_o}{v_p-v_s}\nu_0$。其中 v_p 是波的相速度。可见,当波源离观测者而去时,接受到的波的频率小于发射波频率。反之,当波源向着观测者而来时,接受到的波的频率将大于发射波的频率。前者叫多普勒红移(red shift),后者叫多普勒紫移(violet shift)。1845 年荷兰气象学家巴依斯-巴洛(C. H. D. Buys-Ballot)首次测得声的多普勒效应。

四、分析力学 Analytical Mechanics

分析力学 analytical mechanics 历史上,分析力学是数学、力学工作者为克服力学的牛顿形式(即矢量形式)在处理有约束存在时的困难和麻烦而发展起来的力学理论。它给出了力学系统在完全一般性的广义坐标变换下具有不变形式的动力学方程组,并突出了能量函数的意义。由于其极佳的数学形式,它不仅提供了解决天体力学及一系列动力学问题的较佳途径,同时也为量子理论的发展提供了方便的途径,成为引向现代物理学的跳板。其中最小作用量原理提供了建立相对论力学和量子力学最简洁而又富有概括性的出发点。它是法国数学家拉格朗日(Lagrange)于 1788 年在他的著名论文"Mechanique Analttique"中首先建立的。在该著作中,拉格朗日用分析的方法处理了力学的各种问题,包括静力学、动力学、流体静力学和流体动力学等等。

实位移 real displacement 质点在时间变化过程中实际发生的位移叫实位移。

虚位移 virtual displacement 约束条件允许的但并未实际发生的位移叫虚位移。

广义速度 generalized velocity 在分析力学中,我们把广义坐标对时间的微商叫做广义速度。它在拉格朗日方程中是作为独立变量出现的。

广义力 generalized force 在分析力学中,广义力定义为:

$$Q_\alpha=\sum_{i=1}^{3n}F_i\frac{\partial x_i}{\partial q_\beta}。$$

其中 F_i 是作用在第 i 个质点上的主动力,q_β 是广义坐标。当主动力并不都是保守力的情况下,拉格朗日方程应写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha}-\frac{\partial}{\partial q_\alpha}=Q_\alpha。$$

广义动量 generalized momentum 和某个广义坐标相应的广义动量定义为 $p_a\equiv\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$。$L$ 是拉格朗日函数。当没有外场作用,并且广义坐标取直角坐标时,广义动量和力学动量是相同的。若有外场作用,或者广义坐标取直角坐标以外的独立变数时,广义动量和力学动量一般就不同。例如有电磁场作用的带电质点的运动,其广义动量 $P_\alpha=(P_\alpha-qA/c)$。其中 q 为质点电荷,A 为电磁矢势,c 是真空中光速。

广义能量 generalized energy 当哈密顿函数不显含时间时,它就是动能和势能之和。但若显含时间时,哈密顿函数要写成 $H=2T_2-T_0+V$。其中 T_2 和 T_0 分别是广义速度的二次项和零次项:$T_0\equiv\sum m_i\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial t}\right)^2$,$T_2\equiv\sum m_i\left(\frac{\partial q_\alpha}{\partial t}\right)\left(\frac{\partial q_\beta}{\partial t}\right)$。它显然已经不再是机械能了,但仍有能量的量纲,故称之为广义能量。

共轭动量 conjugate momentum 在哈密顿

动力学中，满足哈密顿正则方程的一对变量广义坐标 q_a 和广义动量 p_a 叫做共轭变量。p_a 就叫共轭动量，也叫正则动量（canonical momentum）。

主动力 active force 主动力是相对于约束反作用而言的。它与施加力的主体的运动状态无关。

约束 constraint 对机械运动所加的强制性的限制条件叫约束。约束可以是几何的，也可以是微分的。对 N 个质点组成的力学系统，加在其上的 s 个约束条件的数学表示式一般可以写成

$$f_i(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N; \dot{\boldsymbol{r}}_1, \dot{\boldsymbol{r}}_2, \cdots, \dot{\boldsymbol{r}}_N; t) = 0,$$
$$i = 1,2,\cdots,s$$

约束公理 axiom of constraints 在牛顿力学中，加在力学系统上的约束可以代之以约束反作用力。例如无滑动的滚动可以用摩擦力来表示；在曲面上的运动可以用曲面的约束反作用力来表示。在分析力学中，约束条件可以用来减少系统的自由度的数目。

约束力 constraint force 如果一个物体不是自由的，根据约束公理，加在力学系统上的约束可以用和约束作用有同样效果的力来代替。该力被称作约束反作用力（constraint reaction force），或简称约束力（constraint force）。

完整约束 holonomic constraint 几何约束和可积分的微分约束统称为完整约束。前者如质点被限制在半径为 R 的圆环上，约束条件是 $x^2 + y^2 = R^2$；后者如圆盘在平面上沿直线作无滑动的滚动：盘心沿直线运动的速度 V_{x0} 和圆盘角速度 ω 之间有下列关系：$V_{x0} = \omega R$。它可以通过积分变成 $x_0 = \theta R$。其中 x_0 是盘心的 X 坐标，θ 是圆盘转过的角度。

非完整约束 non-holonomic constraint 不可积的微分约束叫非完整约束。例如边缘尖锐的圆盘在粗糙平面上沿曲线作无滑动的滚动。着地点的速度 $\boldsymbol{v} = 0$，是对该点速度的约束，若圆盘边缘沿一曲线运动，则上述约束条件可以表示为：$\dot{x}_0 = R\dot{\varphi}\cos\varphi$；$\dot{y}_0 = R\dot{\varphi}\sin\varphi$。其中 ψ 是圆盘本身转过的角度，φ 是圆盘着地点和该点曲线的切线与 X 轴的夹角。一般是不可积分的。

几何约束 geometric constraint 只对系统的几何位形加以限制，而对各质点的运动速度没有加任何限制的约束叫几何约束。约束条件简化为：

$$f_i(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N; t) = 0, i = 1,2,\cdots,s$$

运动约束 kinetic (or differential) constraint 也叫微分约束。对系统运动状态所加的约束条件叫运动约束，或微分约束。但如果该微分约束是可积分的，则它实质上仍是完整约束。真正的微分约束是指不可积的运动约束。

理想约束 ideal constraint 人们把约束力所作虚功之和恒等于零的约束叫理想约束。例如在光滑表面的滑动或在非光滑表面的纯滚动等等。

非理想约束 non-ideal constraint 非理想约束所相应的约束力所做虚功不等于零。例如物体在有摩擦存在的表面上的滑动。

可解[除]约束 removable constraint 约束条件在某种条件下不再成立的叫可解约束，一般可用不等式来表示。可解约束可以是单向可解的，也可以是无条件可解的。单向可解约束如单摆，其约束条件表示为不等式 $x^2 + y^2 \leqslant L^2$。无条件可解的约束如在球面上滑动的物体，当它滑到球面的某个位置 θ_0 时将脱离球面，这时约束关系将不再成立。这就是可解约束。

不可解[除]约束 non-removable constraint 约束条件始终成立的约束叫不可解约束。

稳定约束和不稳定约束 steady and unsteady constraint 不显含时间的约束条件代表的约束叫稳定约束。显含时间的约束条件代表的是不稳定约束。

位形 configuration 质点或质点组在空间的位置及其分布形状叫它们的位形。

自由度 degree of freedom 能完备地描述系统的空间位形所需的独立变数的个数叫系统在有限运动中的自由度数。若一个力学系统由 N 个质点组成，同时存在 s 个独立的约束条件，则该系统的自由度数是 $n = 3N - s$。当存在微分约束时，人们把可以完备地描述该系统运动状态的独立速度分量的个数，叫做系统在

无限小运动中的自由度。

虚位移 virtual displacements 约束允许的位移叫虚位移。和实位移不同,它并不是在时间过程中实际发生的。所以虚位移和时间无关。

达朗贝尔原理 d'Alembert principle 根据牛顿定律,力学系统中第 i 个质点的运动方程为:

$$F_i + N_i = m_i \ddot{r}_i$$

其中 F_i 是主动力,N_i 是约束力。将上式改写为

$$F_i + N_i - m_i \ddot{r}_i = 0$$

则是平衡方程的形式,这里 $m_i \ddot{r}_i$ 可以理解为一种力,称为惯性力,这就是达朗贝尔原理的常用形式。

广义坐标 generalized coordinate 能完备地描述系统空间位形所需的独立参数叫做广义坐标。它的数目等于系统的自由度数。在选定广义坐标后,由 N 个质点组成系统的任意一个坐标 x_i 都可以用广义坐标表示出来:

$$x_i = x_i(q_1 q_2 q_3 \cdots q_n; t)$$

$i=1,2,\cdots,3N$。$n=3N-s$,s 是约束条件的个数。q_i 是广义坐标,$i=1,2,\cdots,n$。

循环坐标 cycle coordinate 也叫可遗坐标(ignorable coordinate)。拉格朗日函数不显含的某个广义坐标称循环坐标或可遗坐标。这时,与该广义坐标相应的广义动量守恒。按定义,广义动量 $p_\alpha \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha}$,由于 $\frac{\partial L}{\partial q_\alpha}=0$,故由拉格朗日方程立即可证明 $p_\alpha=$ 常数。

正则变量 canonical variables 在哈密顿正则动力学中,我们把广义坐标和广义动量作为独立的动力学变量,叫做正则变量。因此在哈密顿动力学中,哈密顿函数必须表示成为广义坐标和广义动量的函数,即 $H=H(q_\alpha, p_\alpha; t)$。

简正坐标 normal coordinates 对于作小振动的系统,各自以单个频率作简谐振动(而不是两个以上频率振动的合成)的广义坐标叫简正坐标。对某些特定的系统,不同的广义坐标可以有相同的振动频率。这就是所谓简并情况。

共轭变量 conjugate variables 广义坐标和相应的广义动量组成一对共轭变量。它们都是哈密顿函数中的独立变量。

拉格朗日 Joseph Louis Lagrange, 1736~1813 18世纪最主要的数学家之一。他具有法国和意大利血统。受哈雷关于牛顿理论的工作的启发,拉格朗日发展了牛顿理论。在1788年出版的巨著《分析力学》以最优美的微分方程的形式表述了牛顿的力学理论。这就是著名的拉格朗日方程,是分析力学的基础。在对万有引力的研究中,拉格朗日还在1777年引进了引力势的概念,它对用引力场来描述引力及以后力学的理论化和分析力学的建立都起着重要作用。他是分析力学的创始人。

拉格朗日动力学 Lagrange dynamics 以拉格朗日函数和拉格朗日方程为出发点的动力学理论叫拉格朗日动力学。也叫分析力学。

拉格朗日函数 Lagrangian 当作用在系统上的主动力都是有势力,而且不显含时间时,拉格朗日函数是系统动能和势能之差:$L=T-V$。其中 T 是系统动能,V 是系统势能。因此拉格朗日函数一般是广义坐标和广义速度的函数,即

$$L = L(q_\alpha, \dot{q}_\alpha; t)$$

拉格朗日方程 Lagrange's equations 一般情况下,拉格朗日方程可以写成:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial T}{\partial q_\alpha} = Q_\alpha$$

其中 $Q_\alpha = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{F}_i \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_\alpha}$ 是广义力,$\alpha=1,2,\cdots,n$,其中 n 是系统的自由度数。

当作用在系统上的外力是有势的时候,拉格朗日方程为:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} - \frac{\partial L}{\partial q_\alpha} = 0 \quad \alpha = 1,2,\cdots,n$$

其中 L 是系统的拉格朗日函数。它是讨论动力学问题的出发点。拉格朗日方程也可以用来讨论其他物理问题,如果该物理问题的拉格朗日函数是已知的。

拉格朗日方程也叫欧拉-拉格朗日方程。因为该方程的一般形式是欧拉首先从数学上给出的。

拉格朗日不定乘子 Lagrange multiplier 无

论是静力学问题还是动力学问题,用拉格朗日方程来讨论时都不能直接解出约束反作用力。为了能在拉格朗日理论的框架下求得约束反作用力,可以采用拉格朗日不定乘子法来求解。它把约束条件(不管是完整约束还是微分约束)用变分形式表示出来(而不是用来减少自由度),在乘以拉格朗日不定乘子后加到原有的虚功原理或达朗贝尔原理给出的方程中,然后利用不定乘子的任意性,消去多余的方程。从而可同时解得约束力和平衡条件或运动规律。

变分运算 calculus of variations 变分运算的基本问题是确定使下列定积分为极值(极大或极小)的函数 $y(x)$:$J=\int_{x_1}^{x_2} f\{y(x), y'(x); x\}\,\mathrm{d}x$。式中 $y'(x)\equiv\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x}$,积分上下限是固定的,即在 $x=x_1$ 和 $x=x_2$ 处 $\delta x=0$。被积函数 f 依赖于非独立变量 $y(x)$ 的泛函形式,所以将 J 叫做泛函(functional)。泛函的极值问题就叫做变分问题。欧拉方程就是通过 J 的变分为零,即是由 $\delta J=0$ 得到函数 $y(x)$ 应满足的方程。

泛函的变分,是指当函数 $y(x)$ 变为 $y(x)+\delta y(x)$ 时,泛函 J 的变化:

$$\delta J[y]=\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{\partial f}{\partial y}\partial y+\frac{\partial f}{\partial y'}\delta y'\right]\mathrm{d}x。$$

若把函数 y 的变分 $\delta y(x)$ 参数化为 $\varepsilon\eta(x)$。其中 ε 是一个小的参数,且当它等于零时就是所求的解。这样一来,泛函取极值的必要条件就成为它对参数 ε 取极值:$\left.\frac{\partial J[y+\varepsilon\eta]}{\partial\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0}=0$。即 $\int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{\partial f}{\partial y}\eta+\frac{\partial f}{\partial y'}\eta'\right]\mathrm{d}x=0$。利用分部积分及固定边界条件可以得到所需的方程:

$$\frac{\partial F}{\partial y_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial {y'}_\alpha}=0$$

$$(\alpha=1,2,\cdots,s)。$$

这就是泛函取极值的必要条件,叫做变分问题的欧拉方程。类似的做法可以导出不同情况下的不同的欧拉方程:

(1)当泛函 J 取决于单个自变量 x 和 n 个函数 $y_\alpha(x)(\alpha=1,2,\cdots,s)$,相应的欧拉方程是

$$\frac{\partial F}{\partial y_\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial F}{\partial {y'}_\alpha}=0$$

$$(\alpha=1,2,\cdots,n)。$$

(2)当泛函 J 取决于单个自变量 x 并只有单个函数 $y(x)$ 及其高阶导数时,欧拉方程为

$$\frac{\partial F}{\partial y}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\frac{\partial F}{\partial y'}+\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\frac{\partial F}{\partial y''}-\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}x^3}\frac{\partial F}{\partial y'''}=0。\quad(\alpha=1,2,\cdots,n)$$

(3)当泛函 J 取决于两个自变量 x, y 和单个二元函数 $u(x,y)$,这时的欧拉方程是

$$\frac{\partial F}{\partial u}-\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial\frac{\partial u}{\partial x}}-\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial F}{\partial\frac{\partial u}{\partial y}}=0。$$

欧拉定理 Euler theorem 在数学上,若函数 f 是独立变量 x 的 n 次幂级数,则有 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}x=nf$。这就是欧拉定理。它也可以推广到多元函数的情况,只要把全微商改成偏微商即可。

泊松 Siměon Denis Poisson,**1781～1840** 法国科学家。在场理论和振动理论方面有很大的贡献。他建立的泊松括号及以后推广为量子力学中的对易关系,至今仍被广泛使用。

泊松括号 Poisson bracket 泊松括号 $[\eta,\varphi]$ 定义了一种运算规则:如果力学量 η 和 φ 都是广义坐标 q_α 和广义动量 p_α 的函数,则有

$$[\eta(q_\alpha,p_\alpha),\varphi(q_\alpha,p_\alpha)]$$

$$\equiv\sum_\alpha\left(\frac{\partial\eta}{\partial q_\alpha}\frac{\partial\varphi}{\partial p_\alpha}-\frac{\partial\varphi}{\partial q_\alpha}\frac{\partial\eta}{\partial p_\alpha}\right)。$$

用泊松括号表示的运动方程可写成:

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=[\varphi(q_\alpha,p_\alpha),H(q_\alpha,p_\alpha)]+\frac{\partial\varphi}{\partial t}。$$

其中 $H(q_\alpha,p_\alpha)$ 是系统的哈密顿函数。

泊松定理 Poisson theorem 如果 u, v 是正则变量广义坐标 q_α 和广义动量 p_α 的函数,而且都是运动积分,则它们的泊松括号也是运动积分。即如果有 $[u,H]=0$,$[v,H]=0$,那么 $[[u,v],H]=0$,这称为泊松定理。

雅可比恒等式 Jacobi identity 若 u、v、w 都是正则变量的函数,可以证明其泊松括号满足恒等式 $[u,[v,w]]+[v,[w,u]]+[w,$

$[u,v]]=0$,称为雅可比恒等式。

勒让德变换 Legendre transformation 勒让德变换是多元函数自变量之间的变换关系。以二元函数 $f(x,y)$ 为例,$\mathrm{d}f(x,y)=\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x+\frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y\equiv u\mathrm{d}x+v\mathrm{d}y$。如果定义一个以 u,y 为变量的新函数 $g(u,y)=ux-f(x,y)$,则有

$$\begin{aligned}&\mathrm{d}g(u,y)\\&=u\mathrm{d}x+x\mathrm{d}u-\frac{\partial f}{\partial x}\mathrm{d}x-\frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y\\&=x\mathrm{d}u-\frac{\partial f}{\partial y}\mathrm{d}y。\end{aligned}$$

另一方面,$\mathrm{d}g(u,y)=\frac{\partial g}{\partial u}\mathrm{d}u+\frac{\partial g}{\partial y}\mathrm{d}y$。于是以 u 和 y 为变量的新的函数 $g(u,y)$ 同样可以用来表示原来的函数关系。只要 $x=\frac{\partial g}{\partial u}$,$\frac{\partial g}{\partial y}=\frac{\partial f}{\partial y}$,这种由原来以 x,y 为变量的函数 $f(x,y)$ 和以 u,y 为变量的函数 $g(u,y)$ 之间的变换关系就叫勒让德变换。它被广泛应用在物理学的各个领域,例如分析力学,热力学等等。

哈密顿 William Rowan Hamilton, 1805～1865 英国数学家、物理学家。1832年发表了《变分作用原理》和《论动力学的一般方法》等论文,发展了分析力学。他用更具动力学意义的广义动量和广义坐标作为正则变量,导出了正则方程,成为物理学各分支的理论框架,至今仍被广泛应用。以后又提出了等时最小作用量原理——哈密顿原理,成为物理理论中的更一般的原理。许多物理理论都可以由哈密顿原理出发导出。

哈密顿函数 Hamiltonian 在拉格朗日动力学中,当拉格朗日函数不显含时间时,哈密顿函数定义为 $H\equiv\sum\dot{q}_\alpha p_\alpha-L$,是一个守恒量。

在哈密顿动力学中,哈密顿函数是以广义坐标和广义动量为正则变量的,表征系统动力学特性的函数。定义为 $H\equiv\sum\dot{q}_\alpha p_\alpha-L\Big|_{\dot{q}\to p,q}$。当该函数不显含时间时,它就是系统的能量,这里 L 为拉格朗日函数。

哈密顿函数密度 Hamiltonian density 在处理连续介质或场的动力学问题时,人们常用单位体积的哈密顿量,即哈密顿密度 h 来表示系统的特性,它和哈密顿量之间有下列关系:$H=\iiint h\mathrm{d}v$,其中 $\mathrm{d}v$ 是空间体积元。

哈密顿动力学 Hamilton's dynamics 以哈密顿正则方程(见哈密顿方程条)为出发点的动力学理论叫哈密顿动力学。其中哈密顿函数以广义坐标和广义动量为独立变量。是系统的特征函数。哈密顿正则方程不仅可以用来描述力学系统,也可以用来讨论其他系统,只要该系统的哈密顿函数已知。

哈密顿原理 Hamilton principle 也叫最小作用量原理(principle of least action)。其表述如下:系统由时刻 t_i 到 t_f 的运动是使作用量 S 取极值所决定的那条路径。即运动方程由 $\delta S=0$ 决定,其中作用量 S 被定义为在固定边界条件下拉格朗日函数对时间的积分

$$S=\int_{t_\mathrm{i}}^{t_\mathrm{f}}L(q_\alpha,\dot{q}_\alpha;t)\,\mathrm{d}t$$

固定边界条件是指在 $t=t_\mathrm{i}$ 和 t_f 时,$\delta q_\alpha=0$。q_α 和 $\dot{q}_\alpha$ 是广义坐标和广义速度。

哈密顿原理可以作为经典力学的基本原理。拉格朗日方程和哈密顿方程都可以由它导出。当以广义坐标 q_α 和广义速度 $\dot{q}_\alpha$ 为独立变量时,即可导出拉格朗日方程。当被积函数用广义坐标 q_α 和广义动量 p_α 为独立变量表示时,就可导出哈密顿正则方程(见哈密顿方程条)。不仅如此,哈密顿原理也可以作为其他物理理论的基本原理,由此导出相应的运动方程。例如广义相对论等等。

哈密顿方程 Hamiltonian equation 也叫哈密顿正则方程(Hamilton's canonical equation)。它是以广义坐标 q_α 和广义动量 p_α 为正则变量,以哈密顿函数为特征函数的偏微分方程即

$$\frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial p_\alpha},\frac{\mathrm{d}p_\beta}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}$$

$$\alpha=1,2,\cdots,n$$

哈密顿主函数 Hamilton principal function 它是满足哈密顿–雅可比方程的生成函数。是生成变换后的广义坐标和广义动量都是常数

的正则变换。

哈密顿特征函数 Hamilton characteristic function 当系统哈密顿量不显含时间时，哈密顿主函数可以分离出含时间变量的部分，剩下的就叫哈密顿特征函数 $W(q_\alpha, \lambda_\alpha)$。$W(q_\alpha, \lambda_\alpha) = S(q_\alpha P_\alpha, t) - f(\lambda_\alpha t)$，而且 $f(\lambda_\alpha, t) = -Et$。

广义势能 generalized potential 拉格朗日函数一般不含有广义速度，但为了能把拉格朗日理论推广到更广的领域，可以将势能项推广到含有速度的情况。这种势能就叫做广义势能。例如带电质点在电磁场中运动时，相应的广义势为：

$$U = e[\varphi + A \cdot v / c]$$

这里 φ, A 分别为电势和矢势，e, v 和 c 分别是质点电荷，速度和真空中光速。

位形空间 configuration space 由 n 个独立的广义坐标构成的 n 维空间叫 n 个自由度的系统的位形空间。

相空间 phase space 由广义坐标和广义动量构成的空间叫相空间。n 个自由度的系统的相空间是 $2n$ 维的。

代表点 representative points 相空间中的一点相应于一组确定的广义坐标和广义动量，即该系统的某一种运动状态。所以它就是这种系统运动状态的代表点。

相轨道 phase trajectory 系统运动状态的变化，在相空间就表现为代表点在相空间中的运动。这些代表点在相空间中的运动轨迹叫做相轨道。

代表点密度 density of representative points 单位相空间体积中代表点的数目叫代表点密度。

刘维尔定理 Liouville theorem 刘维尔定理是说，代表点在相空间中运动时，其密度是不变的，$\frac{d\rho}{dt} = 0$。

正则变换 canonical transformation 正则变换是哈密顿动力学中正则变量之间的一种变换。设 q_α, p_α 和 Q_α, P_α 分别是变换前后的广义坐标和广义动量，它们之间有广义变换：$Q_\alpha = Q_\alpha(q_\alpha, p_\alpha; t)$，$P_\alpha = P_\alpha(q_\alpha, p_\alpha; t)$，相应的哈密顿函数 $H(q_\alpha, p_\alpha; t) \to H = H(Q_\alpha, P_\alpha; t)$。而且变换以后的正则变量和哈密顿量仍然满足哈密顿正则方程，故这种变换叫正则变换。

泛函 functional 见变分运算条

最小作用量原理 principle of least action 当拉格朗日函数不显含时间时，哈密顿原理修改为 $\Delta\int \sum_{\alpha=1}^{n} p_\alpha \dot{q}_\alpha dt = 0$。这就是雅可比最小作用量原理。它相当于定义了一个作用量：$W \equiv \int \sum_{\alpha=1}^{n} p_\alpha \dot{q}_\alpha t' d\tau$，叫做雅可比作用量。

无限小正则变换 infinitesimal canonical transformation 以变换前的广义坐标和变换后的广义动量为变量的生成函数为 $F(q_\alpha, P_\alpha; \tau) = \sum_{\alpha=1}^{n} p_\alpha q_\alpha + \varepsilon G(q_\alpha, P_\alpha)$，当参数 ε 是无限小变量时，它生成的正则变换就叫做无限小正则变换，$Q_\alpha = q_\alpha + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial P_\alpha}$，$p_\alpha = P_\alpha + \varepsilon \frac{\partial G}{\partial q_\alpha}$。很明显，当参数 $\varepsilon = dt$ 时，该变换就和时间有关。而当 G 取哈密顿函数时 $G(q_\alpha, P_\alpha) = H(q_\alpha, P_\alpha)$，它生成的正则变换就是哈密顿正则方程。

生成函数 generating function 有时也叫母函数。它是能生成正则变换的某个函数。它可以是变换前后四组正则变量 $\{q_\alpha, Q_\alpha\}$、$\{p_\alpha, Q_\alpha\}$、$\{q_\alpha, P_\alpha\}$、$\{p_\alpha, P_\alpha\}$ 中任意两组及时间的函数。由它们可以组成四种不同类型的生成函数：$F_1(q_\alpha, Q_\alpha, t)$，$F_2(p_\alpha, Q_\alpha, t)$，$F_3(q_\alpha, P_\alpha, t)$ 和 $F_4(p_\alpha, P_\alpha, t)$。由不同正则变量构成的不同类型的生成函数生成的正则变换如下：

生成函数 $F_1(q_\alpha, Q_\alpha, t)$：$p_\alpha = \frac{\partial F_1}{\partial q_\alpha}$，

$$P_\alpha = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_\alpha},\ H - \mathscr{H} = \frac{\partial F_1}{\partial t}$$

生成函数 $F_2(p_\alpha, Q_\alpha, t)$：$q_\alpha = -\frac{\partial F_2}{\partial p_\alpha}$，

$$P_\alpha = -\frac{\partial F_2}{\partial Q_\alpha},\ H - \mathscr{H} = \frac{\partial F_2}{\partial t}$$

生成函数 $F_3(q_\alpha, P_\alpha, t)$：$p_\alpha = \frac{\partial F_3}{\partial q_\alpha}$，

$$Q_\alpha = \frac{\partial F_3}{\partial P_\alpha},\ H - \mathscr{H} = \frac{\partial F_3}{\partial t}$$

生成函数 $F_4(p_\alpha, P_\alpha, t)$：$q_\alpha = -\frac{\partial F_4}{\partial p_\alpha}$，

$$Q_\alpha = \frac{\partial F_4}{\partial P_\alpha},\ H - \mathscr{H} = \frac{\partial F_1}{\partial t}。$$

哈密顿–雅可比方程 Hamilton-Jacobi equations 哈密顿–雅可比方程是生成函数满足的方程。它有下列形式：$H(q_a p_\alpha, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$ 其中 S 是主函数，它一般是变换前的广义坐标和变换后广义动量的函数，而且后者是与初条件有关的常数。一般用参数 λ_α 表示。H 是变换前的哈密顿量，其中广义动量以主函数生成的正则变换$\frac{\partial S}{\partial q_\alpha}$表示。故哈密顿–雅可比方程的可操作形式为

$$H\left(q_a \frac{\partial S}{\partial q_\alpha}; t\right) + \frac{\partial S(q_\alpha, \lambda_\alpha; t)}{\partial t} = 0$$

作用量变数与角变数 action and angle variable 在研究周期性运动时，定义作用量变数：

$$J_\alpha \equiv \oint \frac{\partial W_\alpha(q_\alpha(q_\alpha; E, C_2, \cdots, C_s))}{\partial q_\alpha} \mathrm{d} q_\alpha。$$

与之相应的共轭变量叫角变数，记作 $A_\alpha = \frac{\partial W}{\partial J_\alpha}$。变换后的哈密顿函数是 $K = H + \frac{\partial W}{\partial t} = H = E(J_1, J_2, \cdots, J_n)$。变换后的哈密顿正则方程给出：

$$\dot{A}_\alpha \frac{\partial K}{\partial J_\alpha} = \dot{A}_\alpha \frac{\partial E}{\partial J_\alpha} (\alpha = 1, 2, \cdots, n)。$$

它的解是 $A_\alpha = \frac{\partial E}{\partial J_\alpha} t - A_{\alpha 0}$。其中 $A_{\alpha 0}$是积分常数。可以证明，$\frac{\partial E}{\partial J_\alpha}$正是力学系统的坐标的周期运动的频率。

作用量变数和角变数表示的最小作用量原理在历史上为量子理论的发展提供了一个理论框架。实际上，只要假定作用量变数 J_α 取分立值：$J = nh$，$(n = 1, 2, \cdots)$，就可得到谐振子能量量子化的结果。$E = \frac{nh}{2\pi} \omega \quad (n = 1, 2, \cdots)$。不同的是在量子力学中，把 n 改成 $n + \frac{1}{2}$。

简正模式 normal mode 和特征频率相应的振动模式叫简正模式。

简正坐标 normal coordinates 和简正频率 **normal frequency** 以一种特征频率振动的广义坐标叫简正坐标。该频率就是简正频率。

五、连续介质力学
Continous Medium Mechanics

连续介质 continuous media 连续介质也叫连续体（continuum），它包括弹性体和流体（气体和液体）。从质点组的观点来看，连续介质的质点之间可以有相对位移或运动，因而是一种变形体。从宏观上看，连续介质力学只讨论介质各部分之间相对位置的变化，即形变或流动，而不考虑其微观结构和整体运动，处理连续介质问题的方法是取质元作为研究对象（质元是有质量的体积元，它在微观上足够大，包含足够多的分子，因而在平衡时有确定的宏观物理特性如温度、压力、密度等；另一方面在宏观上它又是足够小的，因而可以当作质点来处理）。讨论连续介质的运动不仅要计及外力的作用，还特别要研究它的内部各部分之间的相互作用。这是作用在质元表面上的力。因而要引进应力和应变等概念。

流体 fluid 流体是连续介质的一类，是液体和气体的统称。在运动过程中，它本身不能保持确定的形状，各部分之间可以有相对运动。流动性是它们最明显的特征。不同流体的流动性可以是很不相同的，这取决于它们的黏滞性。

黏滞力 viscous force 当各层流体之间有相对运动时，它们之间也会有切向（与相对运动方向相反）的摩擦力。存在于流体中的摩擦力称为黏滞力。

曳引力 drag force 物体在流体中运动时受到的流体对它的阻力就是曳引力。

表面张力 surface tension 表面张力是在液体表面上某一点的任一假想分界线两边液面之间的拉力。可以表示为 $\Delta f = \gamma \Delta l$。其中 γ 叫做表面张力系数，它与液体性质、温度有关。Δf 是通过单位长度分界线两边液面之间的相互作用力，方向指向分界线两边。Δl 是分界线长度。

理想流体　ideal fluid　人们把完全不可压缩的、无黏滞的流体称为理想流体。它是一种关于流体的理想化的模型。

动量密度　momentum density　在连续介质及场的问题中，人们常用单位体积物质的动量来描述物体的动力学性质和状态。动量密度定义为单位体积物质的动量，$p=\rho v$。其中 ρ 是连续介质的质量密度，v 是它的速度。

能量密度　energy density　在连续介质及场的问题中，人们常用单位体积物质的能量来描述物体的能量状态，叫做能量密度。动能密度定义为单位体积物质的动能 $E=\frac{1}{2}\rho v^2$。相应于张应变的弹性势能密度可以表示为 $u=\frac{1}{2}Ye^2$，或者也可以写成 $u=\frac{1}{2}pe$，以及 $u=\frac{1}{2}\frac{1}{Y}p^2$，其中 p、e 和 Y 分别是张应力、张应变和杨氏模量。

拉格朗日函数密度　Lagrangian density　连续体的拉格朗日函数密度定义为单位体积该种介质的拉格朗日函数，即单位体积该种介质的动能和势能之差。

哈密顿函数密度　Hamiltonian density　哈密顿函数密度定义为 $\mathscr{H}\equiv\pi\dot{\eta}-\rho$，其中 π 是广义动量密度，ρ 是拉格朗日密度，$\dot{\eta}$ 是动力学变量 η 对时间的导数。

静水压　static hydraulic pressure　静止流体中只有各向同性的正应力，一般是压力，称为静水压。

研究流体运动的两种方法　two approaches in researching fluid motion　研究流体运动的常用方法有两种。一种是拉格朗日方法（Lagrangian approach），另一种是欧拉方法（Eulerian approach）。

拉格朗日法把流体分成无穷小的流体微元，根据力学的动力学方程研究每个微元的运动轨迹。这种方法的着眼点是每一个流体微元的运动。

欧拉方法研究任一时刻无穷小流体元流经空间各点的速度分布（即速度场），以寻找流体速度场随时间的演化规律。其着眼点是流体的各种物理量的时空分布，如速度场，压力场，密度场等与力场之间的关系。

流线　stream line　流线是流体速度场的形象化描述。流线上每一点的切线方向就是该点速度场的方向。描写流线的运动方程是 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}//\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r},t)$。写成分量的形式为：

$$\frac{\mathrm{d}x}{v_x(x,y,z,t)}=\frac{\mathrm{d}y}{v_y(x,y,z,t)}=\frac{\mathrm{d}z}{v_z(x,y,z,t)}$$

由于流体空间每一点都有确定的速度，故流线是不会相交的，即流线没有分叉点。

流管　tube of flow　在流体内部作一闭合曲线，通过该曲线上的每一点的流线所围成的管子叫做流管。由于流线不会相交，流管内外的流体在运动过程中不会相混合。

定常流动和非定常流动　steady and unsteady flow　流体的速度场不随时间而变的流动叫做定常流动。反之，速度场随时间而变的流动叫做非定常流动。数学上，前者的速度场不显含时间 $v=v(x,y,z)$，后者的速度场显含时间 $v=v(x,y,z;t)$。

流量　flow quantity　单位时间通过流管某一横截面元的流体质量（或体积）叫做流过流管该处的流量。若以 $\mathrm{d}V$ 表示 $\mathrm{d}t$ 时间内经过面元 $\mathrm{d}s$ 的流体体积，则 $\mathrm{d}V=v\cdot\mathrm{d}s$，类似地，若以 $\mathrm{d}m$ 表示 $\mathrm{d}t$ 时间内经过面元 $\mathrm{d}s$ 的流体质量，则有 $\mathrm{d}m=\rho v\cdot\mathrm{d}s$。其中 ρ 是流体密度。所以，流体中通过任意有限曲面的体积流量为 $Q_\mathrm{v}=\int v\cdot\mathrm{d}s$，相应的物质流量为 $Q_\mathrm{m}=\int\rho v\cdot\mathrm{d}s$。对于细流管可以认为流管截面上的速度是一样的，这时的体积流量和物质流量分别为 $Q_\mathrm{v}=v\cdot s$ 和 $Q_\mathrm{m}=\rho v\cdot s$。

连续性方程　continuity condition　对于定常流动，由于流体在运动过程中不会离开流管，故进入任一段流管的流体必定等于流出该流管的流体，即在该流管的任一截面有 $Q_1=Q_2$ 或 $\rho_1v_1s_1=\rho_2v_2s_2$，此即连续性方程。

当地变化率和实体变化率　local variation ratio and absolute variation ratio　在描述流体运动的拉格朗日方程中，流体的运动是用各流体质点的速度 $v(x,y,z,t)$ 来描述的。实际上，流体的

加速度由两部分组成：$\alpha=\frac{\mathrm{d}v(x,y,z,t)}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial v}{\partial t}+(v\cdot\nabla)v$。其中$\frac{\partial v}{\partial t}$叫当地变化率；$(v\cdot\nabla)v$叫漂移变化率。两者之和叫实体变化率。

速度场的一般分析 analysis of velocity field 流体中坐标为 $\boldsymbol{r}_0$ 的某一点的邻域内各点的速度一般可写成

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_0+\mathrm{d}\boldsymbol{v}^{(对)}+\mathrm{d}\boldsymbol{v}^{(反)}。$$

其中第一项 $\boldsymbol{v}_0=\boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_0,t)$是该点邻域小范围中流体整体的平移速度，第二项是流体速度场的对称部分，它的分量形式为

$$\mathrm{d}v_x^{(对)}=\boldsymbol{e}_{11}\mathrm{d}x+\boldsymbol{e}_{12}\mathrm{d}y+\boldsymbol{e}_{13}\mathrm{d}z,$$
$$\mathrm{d}v_y^{(对)}=\boldsymbol{e}_{21}\mathrm{d}x+\boldsymbol{e}_{22}\mathrm{d}y+\boldsymbol{e}_{23}\mathrm{d}z,$$
$$\mathrm{d}v_z^{(对)}=\boldsymbol{e}_{31}\mathrm{d}x+\boldsymbol{e}_{32}\mathrm{d}y+\boldsymbol{e}_{33}\mathrm{d}z。$$

其中 $\boldsymbol{e}_{ij}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j}+\frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right)$。当 $i=j$ 时是不同方向上的张应变速率，

$$\mathrm{d}v_x^{(张)}=\boldsymbol{e}_{11}\mathrm{d}x,\quad \mathrm{d}v_y^{(张)}=\boldsymbol{e}_{22}\mathrm{d}y,$$
$$\mathrm{d}v_z^{(张)}=\boldsymbol{e}_{33}\mathrm{d}z。$$

$i\neq j$ 时是纯切变速率。

第三项是流体速度场的反对称部分。其矢量形式为：$\mathrm{d}\boldsymbol{v}^{(反)}=\omega\times\mathrm{d}\boldsymbol{r}$，其中 $\omega=\frac{1}{2}\nabla\times\boldsymbol{v}$ 是流体元的整体转动角速度。所以，流体的速度场中某点邻域的流速可分为随该点的平移速度与张应变相应的速度和与纯切变相应的速度，以及绕该点的转动速度。

流体的有旋流动和无旋流动 rotational and non-rotational flow 角速度 $\omega=0$ 的流动叫做无旋流动，$\omega\neq0$ 的流动叫有旋流动。

环流量 circulation 流速 $\boldsymbol{v}$ 沿流体中的闭合曲线 C 的线积分 $\Gamma=\oint_c \boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ 叫做该闭合曲线上的环流量。按照斯托克斯定理，环流量可以表示为 $\Gamma=\iint_s 2\omega\mathrm{d}\boldsymbol{S}$。其中积分限是闭合曲线所围的面积，$\omega=\frac{1}{2}\nabla\times\boldsymbol{v}$。

涡线 vortex line 涡旋环绕的曲线叫做涡线。

涡索 vortex lope 在作有旋运动的流体中，处处和当地的 ω 相切的曲线叫涡索。

速度势 velocity potential 对于无旋运动，可以定义速度势 φ：速度可以表示为速度势的梯度：$\boldsymbol{v}=\nabla\varphi$。

体胀速率和不可压缩流体 bulk expanding speed and uncompressed fluid 流体速度的散度 $\nabla\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{e}_{11}+\boldsymbol{e}_{22}+\boldsymbol{e}_{33}=\dot{\theta}$，$\dot{\theta}$就是流体的体胀系数。不可压缩流体的体胀系数为零。故不可压缩流体有 $\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0$。

不可压缩无旋流体的拉普拉斯方程 Laplacian equation of uncompressed and non-rotational fluid 不可压缩流体的速度的散度为零，故其速度势满足拉普拉斯方程：

$$\nabla^2\varphi=0。$$

一般情况下的连续性方程 generalized continuity equation 对于非稳衡流动，连续性方程应在稳恒流动连续性方程中加上密度随时间的变化项，即$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho v)=0$。

帕斯卡原理 Pascal principle 作用在密闭容器中的液体上的压强，将等值地传到液体各处和器壁上。这就是说，在充满不可压缩流体的密闭容器中，流体各点压强相同。

阿基米德原理 Archimedes principle 物体在流体中受到的浮力，等于该物体排开与物体同体积的流体重量。

浮心 center of bounce 浮心就是被物体排开的那部分流体的质心。

毛细现象 capillarity 实验发现，浸润细管管壁的液体在细管中上升，而不浸润细管管壁的液体在细管中下降。这种现象叫做毛细现象。

场 field 场是用来描述空间各点的某种物理对象的。它可以是物质场，例如引力场，电磁场等，也可以是某种物理量，如连续介质中的位移场，速度场，压力场等。在相对论量子力学发展以后，人们就用量子场来描述所有的微观对象。场的概念甚至可以用来描述凝聚态物理中的元激发。

雷诺数 Reynolds number 雷诺的大量实验表明，流体由层流过渡到湍流的临界速度 V 总是与无量纲量数 $\rho vl/\eta$ 的一定数值相对应。索末菲把这个无量纲数叫做雷诺数。它由与黏滞流体有关的物理量组成。其中 ρ 是流体

的密度，v 是流速，l 是管子内径，η 是流体的黏滞系数。实验发现，由层流到湍流的过渡区对应的雷诺数 Re 约为 2000～2600。这就是临界雷诺数。

层流 laminar flow 1880 年前后英国的实验流体力学家雷诺研究了流体在长管里的流动。为此他在管中加了一根细管，并通以有色液体来观察流体流动状态的变化，他发现当流体缓慢流动时，从细管中流出的有色流体呈一线状，各层流体互不相混杂。这种流动就叫做层流。

湍流 turbulent flow 在雷诺的实验中，当管中流体的流速逐渐加大时，有色液体就会与周围流体相混杂，并可观察到流动的涡状结构。这就是湍流运动。

曳引系数和曳引力崩溃 drag coefficient and drag crisis 实验发现，在流体中以匀速 $\boldsymbol{v}$ 运动的物体受到的阻力等于物体不动，流体以速度 $\boldsymbol{v}$ 流过物体时流体给物体的曳引力。它可以表示为 $f = C_D \dfrac{\rho v^2 S}{2}$，$f$ 的方向和速度方向相反。其中 C_D 就是曳引系数。它随物体形状的不同而不同。例如对于半径为 R 的球体，$C_D = 24/R$。但当雷诺数增大到一定程度后，曳引系数 C_D 会突然急剧下降。这种现象叫做曳引力崩溃。

伯努利定理 Bernoulli theorem 伯努利定理是关于理想流体作稳恒流动时沿流线的功能原理。它可以由欧拉方程沿流线的第一积分得到。表示为：

$$\frac{v_2^2}{2g} + \frac{U_2}{g} + \frac{p_2}{\rho g} = \frac{v_1^2}{2g} + \frac{U_1}{g} + \frac{p_1}{\rho g}。$$

其中脚标 1,2 表示流线上的任意两点，v_1，v_2 是流线上 1,2 两点的流动速度；U_1，U_2 是流线上 1,2 两点的重力势能；p_1，p_2 是流线上 1,2 两点的压力。

理想流体作无旋的稳恒流动 non-rotational and steady flow of ideal fluid 理想流体作无旋的稳恒流动时欧拉方程可以简化为：

$$\nabla\left(\frac{1}{2}\rho v^2 + p + \rho U\right) = 0$$

托里切利公式 Torricelli formulae 1643 年意大利科学家托里拆利用他发明的水银气压计测量了大气压，他所用的公式是静止流体中的压强分布公式，它实际上就是伯努利定理在静止流体中的表现。由于水银管中一端压力为零，故大气压强就是水银柱高出水银面的高度。

理想流体的动力学方程 dynamic equation of perfect fluid 理想流体的动力学方程就是欧拉方程：

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} - \rho \boldsymbol{v} \times (\nabla \times \boldsymbol{v}) + \rho \nabla\left(\frac{1}{2} v^2\right) + \nabla \rho p = \boldsymbol{f}。$$

其中 f 是作用在单位质量流体上的外力，也叫体力密度。

欧拉方程的第一积分 first integral of Euler's equations (1)沿流线的积分　对于不可压缩流体的稳定流动，如果作用在流体上的体力密度 $\boldsymbol{f}$ 是有势的，即 $\boldsymbol{f} = -\nabla U$。则沿流线的积分可得伯努利方程。

$$\frac{1}{2}\rho v^2 + p + \rho U = 常数(沿流线)。$$

其中 U 是单位质量的流体的势能密度。值得注意的是上述等式中的常数对不同的流线是不同的。

(2)无旋的稳恒流动　由于流动稳恒而无旋，欧拉方程直接给出伯努利方程

$$\frac{1}{2}\rho v^2 + p + \rho U = 常数。$$

和沿流线的第一积分不同之处在于这时的方程对整个流体都适用，并不局限于某条流线。

(3)无旋非稳恒流动　用速度势表示的无旋非稳恒流动的欧拉方程有下列形式：

$$\rho \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2}\rho(\nabla \varphi)^2 + p + \rho U = f(t)。$$

这是伯努利方程在非稳恒情况下的推广，有时也被称为压力方程。

开尔文定理 Kelvin theorem 当作用在流体上的体力是有势的时候，环流量 Γ 满足下列关系：$\dfrac{d\Gamma}{dt} = 0$。这就是开尔文定理。它表明涡流不能产生或消灭，它随着流体质点一同漂移。

绕流 wind flow 流体在其流动的过程中遇到物体,将从物体两侧绕过,并继续流动。这种现象叫做绕流。

黏滞性 viscosity 某些流体在运动中存有内摩擦,这种性质叫黏滞性。

黏滞流体 viscosity fluid 速度不同的流层之间可能存在摩擦力,有这种摩擦力的流体叫做黏滞流体。

无黏滞流体 non-viscosity fluid 在特定的问题中,如果黏滞性并不起重要作用,就可以把实际的流体抽象为无黏滞流体。

茹可夫斯基定理 Zhukovskii theorem 当物体与液体有相对运动时,物体除了受到液体的阻力外,有时还会受到与运动方向相垂直的力,这种横向力统称为升力(lift)。1906年,俄国科学家茹可夫斯基提出,升力与速流场绕物体的环量成正比,其大小为 $F_{升}=-\rho U\Gamma_c$,其方向与物体运动方向垂直。其中 ρ 是流体密度,U 是相对速度,$\Gamma_c=\oint_{(c)} v\,\mathrm{d}l$ 是流场绕物体的回路 c 的环量。

涡度 vorticity 流场绕物体的回路 C 的环量 Γ_c 和回路面积之比叫做涡度。

弹性体 elastomer 弹性体是连续介质的一种,它在外力作用下会发生形变,但在弹性范围内当外力撤去后又会恢复原状,保持一定的大小和形状。

应变 strain 应变是描述连续介质变形的物理量。固体的应变有两种基本形式,与正应力相应的是体应变;与剪切应力相应的是切应变。

应力 stress 应力是物体中各部分之间的相互作用。为描述这种内部作用,可设想过某点有一截面元 ΔS,把两边的物质分开,它的方向任意,截面上的应力定义为:$\tau=\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}s}$。可把应力分解成沿面元的法线方向和切线方向两个分量。前者叫正应力(normal stress),后者叫切应力(shearing stress)。对于非各向同性的介质来说,应力不仅与面元的位置有关,而且也与其取向有关。在MKS制中,应力的单位为“牛顿/米^2(N/m^2)”,称为“帕斯卡(pascal)”,记作Pa。其量纲是$[\tau]=\mathrm{ML^{-1}T^{-2}}$。

杨氏模量 Young modulus 杨氏模量 Y 是张应力和张应变的比例系数,只与材料的性质有关,而与物体的尺寸无关。它和劲度系数 k 有下列关系,$Y=kL/S$。其中 L 是弹性体的长度,S 是它的横截面积。

泊松比 Poisson ratio 弹性棒伸长或缩短时,它的横截面积也发生变化。对于各向同性的材料,横向张协变 e_{22}、e_{33}正比于纵向协变 e_{11}。其比例系数就是泊松比 $\sigma=-e_{22}/e_{11}=-e_{33}/e_{11}$。

拉密模量 Lamete modulus 在普遍的胡克定律中,用张应变表示的张应力中,比例系数 $\lambda=\frac{\sigma Y}{(1+\sigma)(1-2\sigma)}$和 $\mu=\frac{Y}{2(1+\sigma)}$叫拉密模量。其中 σ 是泊松比,Y 是杨氏模量。

容积弹性模量 bulk elastic modulus 在均匀压强作用下弹性体体积变化的百分率之比叫做容积弹性模量 K,$K=\frac{Y}{3(1-2\sigma)}$,其倒数叫做压缩率。

弹性极限 limit of elasticity 实验表明,胡克定律只在一定的限度内才成立,超过这个限度就不再成立。这个限度就是弹性极限。

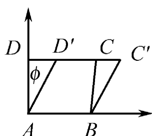
弹性形变 elastic deform 弹性体在弹性限度内发生的形变是弹性形变。当外力撤除后,弹性体会恢复原状。

塑性形变 plastic deform 当作用在弹性体上的外力使应变超过弹性限度时,物体不再是弹性的,这时,即使撤除外力应变也不全部消失。这种未消失的形变叫做塑性形变。

蠕变 worm deform 当超过弹性限度的恒定应力作用在弹性体上时,材料的形变将不断地缓慢增加,这种形变叫做蠕变。

极限强度 limit strength 当作用在弹性体上的应力超过某一极限而使之断裂。这一极限叫做极限强度。

切应变 shearing strain 在长方形的弹性体 $ABCD$ 的两个平行面上作用一对大小相等、方向相反的力,使之变形为 $ABC'D'$(如下页图)。这种形变就叫做切应变或剪应变。



切变角　shearing angle　上图中角 ϕ 是标志切变大小的物理量，叫切变角。也称作切应变。记作 e_{12}。弹性体在发生切变时，也有一种复原的趋势，具体来说，平行于底面 AB 的任一截面两方以平行于截面的切变力 F_t 相互作用。单位面积上的这种力叫做切应力记作 p_{12}。在弹性限度范围内，相应的胡克定律表示为 $p_{12}=ne_{12}$，即 $\frac{F_t}{S}=n\phi$。n 是切变模量（或刚性模量）。

切变模量　shearing modulus　在切应变的胡克定律中，切应力和切应变之间的比例系数 n 叫材料的切变模量（或刚性模量）。

纯切变　pure shearing deform　不包括转动成分在内的切应变叫纯切变。

切变弹性势能密度　potential density of elastic shearing deform　切变弹性势能密度 $v_{切}$ 可以有多种形式，用切应角 e_{12}，e_{23}，e_{31}可以表示为：$v_{切}=n(e_{12}^2+e_{23}^2+e_{31}^2)$；用变切角 ϕ 可以表示为：$v_{切}=\frac{n}{2}n\phi^2$；用切应力 p_s 可以表示为：$v_{切}=\frac{1}{2n}p_s{}^2$。其中 n 是变切模量。

扭转力矩　momentum of torsion　扭转力矩是指作用在圆柱截面上的切向力对于柱轴的力矩。

扭转角　angle of torsion　在一端固定的均匀截面圆柱体的另一端加一力偶矩，将使之发生扭转形变。人们用圆柱体母线相对于原始位置的偏转角来描述扭转形变。该偏转角叫做扭转角。对于均匀圆杆来说，扭转力矩 M 和扭转角 θ 之间有下列关系：

$$M=\frac{\pi nr^4}{2l}\theta。$$

其中 r 是圆柱截面半径，l 是其长度，n 是切变模量。

纯弯曲　pure bend　取截面相同的一均匀杆，一端固定，另一端加一个其方向垂直于杆的轴，并且平行于杆的截面的力偶矩 M，将使该杆的各部分发生大小不等的转动，这就是杆的纯弯曲。

挠曲力矩　torque of flexion　简称挠矩。伯努利假定，杆的每一截面在弯曲后仍保持为平面，这时，杆中任意截面两边相互作用的力矩就叫做挠力矩。$M=\int yp_{11}\mathrm{d}s=\int Y\frac{y^2}{R}\mathrm{d}s=\frac{Y}{R}\int y^2\mathrm{d}s$。其中 y 是截面上的面元到与中心线垂直的轴线的距离。

张应变弹性势能密度　potential density of normal strain　相应于张应变的势能密度可以表示为：

$$v_{张}=\left(n+\frac{1}{2}\lambda\right)(e_{11}^2+e_{22}^2+e_{33}^2)+\lambda(e_{11}e_{22}+e_{22}e_{33}+e_{33}e_{11})。$$

其中，n 是切变模量，λ 是拉密模量。（见“拉密模量”）。

伯努利-欧拉定律　Bernoulli-Euler law　伯努利-欧拉定律是关于挠力矩和杆中线曲率半径之间关系的定律：$M=YI/R$。其中 Y 是该杆材料的杨氏模量，$I=\int y^2\mathrm{d}s$ 是杆截面相对于截面内与中线相垂直轴的“转动惯量”，R 是杆中线的曲率半径。

截面模量　cross section modulus　在杆发生弯曲形变时，使其不致断裂的最大应力强度可以表示成为 $p_{\max}=Yh/R$。其中 h 就是截面模量。对于一端的弯曲力矩来说，杆的截面模量越大，最大应力强度越大，越不容易断裂。

应变张量　strain tensor　变形体中任一点的位移可以用该点附近选定的参考点的应变张量来表示：

$$\begin{pmatrix}\mathrm{d}\xi\\ \mathrm{d}\eta\\ \mathrm{d}\zeta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e_{11}&e_{12}&e_{13}\\ e_{21}&e_{22}&e_{23}\\ e_{31}&e_{32}&e_{33}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix},$$

其中 $\begin{pmatrix}e_{11}&e_{12}&e_{13}\\ e_{21}&e_{22}&e_{23}\\ e_{31}&e_{32}&e_{33}\end{pmatrix}$ 是应变张量。

应变主轴　principal axis of strain　应变张量是一个实对称矩阵，通过适当的坐标转动，可

以使矩阵对角化。$\begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \end{pmatrix}$。使应变张量取对角形式的坐标轴叫做应变主轴。

主张应变 principal strain 以对角化形式出现在应变张量中的三个对角元素分别是参考点邻近沿三根应变主轴的张应变，叫做主张应变。

体胀系数 coefficient of bulk expand 应变张量矩阵的对角元素之和叫体胀系数。在数学上，这就是应变张量的迹(trace)。

圣维南方程和相容条件 Sen Vinan equations and consistence condition 应变张量必须满足圣维南方程：

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial e_{31}}{\partial x}+\frac{\partial e_{12}}{\partial y}-\frac{\partial e_{23}}{\partial z}\right)=\frac{\partial^2 e_{11}}{\partial y\partial z},$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial e_{12}}{\partial z}+\frac{\partial e_{23}}{\partial x}-\frac{\partial e_{31}}{\partial y}\right)=\frac{\partial^2 e_{22}}{\partial z\partial x},$$

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial e_{23}}{\partial x}+\frac{\partial e_{31}}{\partial y}-\frac{\partial e_{12}}{\partial z}\right)=\frac{\partial^2 e_{33}}{\partial x\partial y},$$

才能求得邻近一点在形变时的位移。从这个意义上说，圣维南方程是应变张量的相容条件。从另一方面来说，邻近一点的位移是空间的连续函数。所以，作为连续介质的弹性体，其各部分形变前后仍完美地相互衔接，不至于在某些地方断开，在某些地方重叠。所以圣维南方程又可以说是应变的连续性方程。

应力 stress 弹性体内给定平面两边单位面积上的弹性力叫应力强度，或简称应力。

应力张量 stress tensor 过弹性体内一点各方向的截面上的应力可用应力张量来表示：

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

，其中 α、β、γ 分别是过该点的任一截面的方向余弦。其中 $\begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} \end{pmatrix}$ 就是应力张量。

应力主轴 principal axes of stress 应力张量是实对称张量，故可以通过坐标变换将其对角化。使应力张量对角化的坐标轴叫做应力主轴。

主张应力 principal axes of stress 对角化后的应力张量只有对角元素，它们就是主张应力。

应力和应变的关系 relationship between stress and strain 在弹性限度内，应力张量和应变张量之间有下列关系：$p_{11}=\lambda\theta+2ne_{11}$，$p_{22}=\lambda\theta+ne_{22}$，$p_{33}=\lambda\theta+ne_{33}$，$p_{12}=2ne_{12}=2ne_{21}$，$p_{23}=2ne_{23}=2ne_{32}$，$p_{31}=2ne_{31}=2ne_{13}$。

应力张量的相容条件 consistence condition 由应变张量的相容条件可以导出应力张量的相容条件：

$$\frac{1}{Y}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)p_{11}+\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)p_{22}-\sigma\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)p_{33}\right]=\frac{1}{n}\frac{\partial^2 p_{12}}{\partial x\partial y},$$

$$\frac{1}{Y}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)p_{22}+\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)p_{33}-\sigma\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)p_{11}\right]=\frac{1}{n}\frac{\partial^2 p_{23}}{\partial y\partial z},$$

$$\frac{1}{Y}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)p_{33}+\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\sigma\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)p_{11}-\sigma\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2}+\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)p_{22}\right]=\frac{1}{n}\frac{\partial^2 p_{31}}{\partial z\partial x},$$

$$\frac{1}{2n}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial p_{23}}{\partial x}+\frac{\partial p_{31}}{\partial y}-\frac{\partial p_{12}}{\partial z}\right)=\frac{1}{Y}\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}(-\sigma p_{11}-\sigma p_{22}+p_{33}),$$

$$\frac{1}{2n}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial p_{31}}{\partial y}+\frac{\partial p_{12}}{\partial z}-\frac{\partial p_{23}}{\partial x}\right)=\frac{1}{Y}\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}(-\sigma p_{22}-\sigma p_{33}+p_{11}),$$

$$\frac{1}{2n}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial p_{12}}{\partial z}+\frac{\partial p_{23}}{\partial x}-\frac{\partial p_{31}}{\partial y}\right)=\frac{1}{Y}\frac{\partial^2}{\partial z\partial x}(-\sigma p_{33}-\sigma p_{11}+p_{22})。$$

弹性体的平衡条件 equilibrium condition 弹性体的平衡条件可以用应力张量的形式表示：

$$\frac{\partial p_{11}}{\partial x}+\frac{\partial p_{12}}{\partial y}+\frac{\partial p_{13}}{\partial z}+f_x=0,$$

$$\frac{\partial p_{21}}{\partial x}+\frac{\partial p_{22}}{\partial y}+\frac{\partial p_{23}}{\partial z}+f_y=0,$$

$$\frac{\partial p_{31}}{\partial x}+\frac{\partial p_{32}}{\partial y}+\frac{\partial p_{33}}{\partial z}+f_z=0,$$

也可以表示为应变张量的形式：

$$2n\left(\frac{\partial e_{11}}{\partial x}+\frac{\partial e_{12}}{\partial y}+\frac{\partial e_{13}}{\partial z}\right)+\lambda\frac{\partial\Theta}{\partial x}+f_x=0,$$

$$2n\left(\frac{\partial e_{21}}{\partial x}+\frac{\partial e_{22}}{\partial y}+\frac{\partial e_{23}}{\partial z}\right)+\lambda\frac{\partial\Theta}{\partial y}+f_y=0,$$

$$2n\left(\frac{\partial e_{31}}{\partial x}+\frac{\partial e_{32}}{\partial y}+\frac{\partial e_{33}}{\partial z}\right)+\lambda\frac{\partial\Theta}{\partial z}+f_z=0。$$

拉密方程　Lamete equations　以位移表示的平衡方程叫拉密方程：

$$n\nabla^2\xi+(n+\lambda)\frac{\partial\Theta}{\partial x}+f_x=0,$$

$$n\nabla^2\eta+(n+\lambda)\frac{\partial\Theta}{\partial y}+f_y=0,$$

$$n\nabla^2\zeta+(n+\lambda)\frac{\partial\Theta}{\partial z}+f_z=0。$$

它也可以写成矢量的形式：

$$n\nabla^2 s+(n+\lambda)\nabla\Theta+f=0。$$

无外力作用时弹性体中的波动　wave motion of elastic body with no external force　当弹性体不受外力作用时，其运动方程为 $n\nabla^2 s+(n+\lambda)\nabla\Theta=0$。对它两边求梯度即得其波动方程：$\rho\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}=(2n+\lambda)\nabla^2\Theta$。这就是弹性体的体胀系数的波动方程。相应的波速为 $\sqrt{\frac{2n+\lambda}{\rho}}=\sqrt{\frac{(1+\sigma)}{\rho(1+\sigma)(1-2\sigma)}}Y$。这种波叫做体胀波(bulk expanding wave)。

扭曲波　torsional wave　若对弹性体的波动方程 $\rho\frac{\partial^2\theta}{\partial t^2}=(2n+\lambda)\nabla^2\Theta$ 取旋度，则有另一种波动方程：$\rho\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}=n\nabla^2\varphi$。其中 $\varphi=\nabla\times s$。这个波动方程描写的是 $\nabla\times s$ 的传播规律。其速度为 $\sqrt{\frac{n}{\rho}}=\sqrt{\frac{1}{2\rho(1+\sigma)}}Y$。这种波叫做扭曲波。

连续介质的拉格朗日方程　Lagrange equation for continuous medium　若连续介质的动力学变量为 $\eta(x,y,z,t)$，相应的拉格朗日函数密度为 $L(\eta,\nabla\eta,\dot\eta,t)$，其中 $\nabla\eta$ 是 $\eta(x,y,z,t)$ 的梯度，$\dot\eta$ 是 $\eta(x,y,z,t)$ 对时间的微商，相应的拉格朗日方程为

$$\frac{\partial L}{\partial\eta}=\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial\dot\eta}+\sum_{k=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial\eta}{\partial x_k}\right)}。$$

因为包含了对时间的偏微商项，故可以把它看做是广义拉格朗日方程。

如果用 x_i 统一表示时空坐标，拉格朗日方程还可写成更紧凑的形式：

$$\frac{\partial L}{\partial\eta}=\sum_{k=1}^{4}\frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial\eta}{\partial x_k}\right)}$$

连续介质的哈密顿方程　Hamilton equation for continuous medium　定义泛函导数 $\delta/\delta\eta_\alpha=\frac{\partial}{\partial\eta_\alpha}-\sum\frac{d}{dx_k}-\frac{\partial}{\partial\left(\frac{\partial\eta_\alpha}{\partial x_i}\right)}$，则连续介质的哈密顿正则方程为：$\frac{\delta H}{\delta\eta}=-\dot\pi$，$\frac{\delta H}{\delta\pi}=\dot\eta$。其中 $\pi=\frac{\partial L}{\partial\dot\eta}$ 是相应于 η 的动量密度，它和 η 是动力学变量，用它们表示的哈密顿量密度为 $\mathscr{H}=\pi\dot\eta-L$。它对空间坐标的积分就是总哈密顿函数：

$$H=\int dx\,dy\,dz\,\mathscr{H}$$

六、相关杰出科学家的简要介绍

Concise Introduction of Interrelated Excellent Scientists

牛顿　Newton, Sir Isaac, 1642～1727　牛顿是英国数学家、天文学家、物理学家，经典物理学的奠基人。1642年2月25日(英国旧历)出生在林肯郡(Lincolnshire)的伍尔索普村(Woolsthorpe)。12岁起在格兰萨姆(Grantham)公立学校上学。1661年考上剑桥大学三一学院。1664年被依萨克·巴罗教授接受为研究生，并于1665年获学士学位。在他的手稿中是这样描述他的这段创造高潮时期的："1665年初，我发明了级数近似法和把任何幂的二项式化成这样一个级数的规则。同年5月，我发明了格瑞高里(Gregory，1638～1693，

苏格兰数学家)和斯卢西乌斯(Slusius)的切线法,而11月间又得出了流数的直接方法。次年1月得出颜色理论,继而在5月间,得到了反流数法。就在这一年(1666年),我开始考虑延伸到月球轨道的引力,并且在弄清怎样估算在球面内运行的球状物体对球面的压力之后,就从开普勒关于行星公转周期同它们到各自轨道中心的距离的二分之三次方成比例的定律中推得,让行星保持在它们的轨道上运行的力必定与它们绕之旋转的中心到行星的距离平方成反比。于是我进一步比较了把月球保持在它运行的轨道上所必需的力和地球表面的万有引力,发现两者差不多密合。"以后在《原理》一书中(第三卷,命题Ⅲ),牛顿正式发表了他的计算结果:月球受地球的引力 $F=4\pi^2 K \frac{m}{R^2}$,相应的加速度 $a_m=30.017$(巴黎尺/分^2),和由惠更斯的单摆实验得到的结果一致。万有引力的平方反比定律得到证实。1667年3月底,牛顿再度回到剑桥,并于10月1日被选为选修课研究员(minor fellow of trinity),次年3月16日获得硕士学位。1669年10月29日,牛顿接替他的老师任剑桥大学的卢卡锡讲座教授,从1670年开始在剑桥大学正式授课。1669年前后写成的《运用无穷多项的方程的分析学》,1671年发表的《流数法和无穷级数》,1676年发表的《求曲边形的面积》,这些著作都是牛顿对微积分学的主要贡献。1711年牛顿就他在微积分的多年工种作了一个总结,发表了《使用级数、流数等等的分析》,牛顿于1687年发表的《自然哲学数理原理》(*Philosophiae Naturalis Principia Mathematica*),标志着经典力学体系的建立。它是以四个绝对化的概念:空间、时间、质量和力为基础,以三个基本定律为核心,以万有引力定律为它的最高综合,并用微积分为数学工具来描述物体运动的因果律。这是一个立足于实验和观测的基础之上、结构严谨、逻辑严密的科学体系。在这一划时代的著作中,牛顿在总结了前人有关工作的基础上,把吉尔伯特(W.Gilbert)关于哥白尼理论的物理原因的猜想加上开普勒关于行星运动的经验定律以及他本人和莱布尼茨(G.W.Leibniz,1646～1716)分别独立发现的微积分学的计算使地面力学和天体力学理论统一成为一个严密的体系,从而成为整个经典力学的基础。实现了物理学的第一次大统一,奠定了牛顿作为最伟大的经典物理学大师的地位。1699年牛顿被选为巴黎科学院的外国院士。1703年成为英国皇家学会会长。同年又出版了《三次曲线的枚举》、《利用无穷级数求曲边形的面积》、《流数术》(即微积分)等数学著作。1705年牛顿由于他的科学成就被封为爵士,成为英国贵族。

牛顿在光学方面的成就也是极其伟大的。早在1664年,他就做了关于日冕的观测。1666年牛顿利用三角玻璃棱镜成功地进行了分光实验,把白光分解成为有色的光。牛顿还在研究光学的过程中发现了球面像差和色差现象。1671年在他成为皇家学会委员时,牛顿在提交的一篇论文"光和颜色的新理论"中,提出了光的粒子性理论。这一论点和当时胡克的波动说相反,引起了一场先后持续了200多年的大论战。直到20世纪初才以光的波粒二象性为结论而告一段落。1704年牛顿的《光学》一书问世,系统地论述了他在光学方面的研究成果,包括牛顿环,描述了光的衍射现象,特别是他还研究了光的振动理论,提出了光的"猝发的间隔"的概念,这和光的波动理论中的波长概念相类似,尽管他一直坚持光的粒子说。

牛顿在自然科学的方法论方面也做出了奠基性的贡献。他主张科学研究要通过实验发现现象,然后应用归纳法总结为定律,再用数学推演建立理论体系。这一重要的科学方法对后来自然科学的发展起了很大的指导和推动作用。

牛顿是这样评介自己的:"我好像是站在海滨玩耍的孩子,时而拾到几块莹洁的石子,时而拾到几片美丽的贝壳,并为之欣喜。那浩瀚的真理的海洋仍然在我的前面未被发现。""如果我所见的比笛卡儿要远一点,那是因为我是站在巨人们的肩膀上的缘故。"

伽利略 Galileo; Galilei 伽利略(1564～1642)是意大利数学家、物理学家、经典力学的

奠基人、定量物理学的创始人。

伽利略于 1564 年诞生在意大利比萨城。祖辈是佛罗伦萨的名门贵族。父亲是有名的音乐演奏者、作曲家和杰出的数学家。伽利略 11 岁时进入法洛姆博罗莎经院接受古典教学。17 岁时进入比萨大学医学院,但却潜心钻研数学,并利用自制的仪器进行自然科学实验。由于忽略了对医学的学习,以致没有获得学位而离开了学校,搬迁到佛罗伦萨。在那里他继续进行数学和自然科学的研究,并于 1586 年写出论文《水称》。1588 年又发表论文《固体的重心》,引起了学术界的注意。1589 年在友人吉杜巴尔多伯爵推荐下被比萨大学聘为数学客座教授。在此期间伽利略开始研究落体问题。1592 年 12 月被帕多瓦大学聘为数学教授,以后被聘为终身教授。在这里,伽利略自制了望远镜、显微镜和空气温度计。1609 年伽利略制成了世界上第一架放大倍数达 32 倍的天文望远镜。利用望远镜,伽利略做了重要的天文观测,特别是发现木星有四个卫星围绕它旋转,表明在地球以外存在着不以地球为中心的天体。这些发现是对哥白尼、布鲁诺观点的有力支持。1610 年意大利新国王科西摩二世邀请他回到佛罗伦萨,聘为宫廷哲学家和大学里的首席数学家。就在这一年伽利略出版了《星宿的信使》,通俗地向读者介绍他所观测到的天空现象。1632 年伽利略出版了《关于托勒玫和哥白尼的两大世界体系的对话》。因为本书,伽利略被招回罗马接受宗教裁判所的审判。经过长时间的审判,主教团宣判:(1)《对话》是禁书;(2)在三年里,他必须每周把七篇忏悔书背诵一遍;(3)他将无限期地被监禁在家里,直到主教团满意为止。可是,就在他被监禁期间,1635 年他又完成了另一部著作《关于两种新科学的对话》。该书于 1637 年底在荷兰秘密出版。直到三百多年后的 1979 年 11 月 10 日,罗马教皇才在公共集会上公开宣布,伽利略在 17 世纪 30 年代受到的教庭审判是不公正的。1980 年教皇又在梵蒂冈举行的世界主教会议上宣布需要重新审理这个冤案。为此正式成立了一个由不同宗教信仰的著名科学家组成的委员会,主持审理此案。六名委员包括杨振宁、丁肇中在内,全都是诺贝尔奖获得者。

伽利略在研究落体问题时创建了对物理现象进行实验研究,并创立了实验方法与数学推算和逻辑论证相结合的科学方法,是给人类留下的宝贵财富。爱因斯坦评论说:“伽利略的发现,以及他所用的科学推理方法是人类思想史中最伟大的成就之一,而且标志着物理学的真正开始”。

开普勒 Johannes Kepler,1571～1630　1571 年 12 月 27 日开普勒出生在德国符腾堡。12 岁入修道院学习,1587 年进入杜宾根大学,跟随米彻尔·马斯特林(Michael Màstlin 1550～1631)教授学习数学和天文。1591 年以全校第二名的优异成绩获得硕士学位。1596 年出版《宇宙的神秘》(*Mysterium Cosmograghicum*)。被第谷·布拉赫(Tycho Brahe 1546～1601)邀请到布拉格郊外的观象台从事研究工作,协助第谷整理观测资料和编制星表。1601 年第谷逝世后,开普勒成为他的法定继承人,皇家数学家。特别是继承了第谷在赫芬岛上 20 年的天文观测记录,为他以后确立著名的三定律提供了坚实的实验基础。1606 年在他出版的《新星》(*Nova*)中,第一次发表了他在 1604 年前后观测到的蛇夫座附近的新星,以后被叫做开普勒新星。1609 年开普勒在《新天文学》(*New Astronomy*)发表了他在分析了关于火星的大量观测资料发现的运动规律,以后又把这两个定律推广到所有的行星运动。1619 年开普勒在以《宇宙的和谐》(*Harmonies of the World*)为名的新书中,发表了包括前两个定律在内的开普勒三定律,被人尊为“天空的立法者”。此外,开普勒还对光的折射现象作了深入的研究,发表了《折射学》,并制造了第一架以凸透镜为目镜的望远镜,从 17 世纪中叶起就被各国天文台普遍采用,被称为“开普勒望远镜”。1627 年开普勒在他去世前不久,还遵照第谷的遗愿,几经周折,出版了深受航海家欢迎的精确的《鲁道夫天文表》。1630 年 11 月 15 日开普勒逝世。

欧拉 Léonnard Euler　1707 年 4 月 15 日生于瑞士巴塞尔附近的一个牧师家庭。14 岁进

入巴塞尔大学，跟随J.伯努利学习数学。1726年开始独立进行数学研究工作。1727年应邀到俄国圣彼得堡科学院工作，1731年获理学教授称号。1741年又应邀到柏林科学院工作，1759年之后他实际担任该科学院院长职务。1766年以后欧拉又应邀去俄国工作。1783年9月18日在圣彼得堡逝世。

欧拉是一位极其高产的数学家，是18世纪应用数学的大师。他对数学的研究主要着眼于解决物理学和其他相关的工程技术问题。欧拉的第一篇文章就是关于阻尼介质中的等时曲线的结构问题。以后欧拉又研究了弹道问题和如何科学地绘制地图的问题。而在柏林期间，他得出了理想流体运动的微分方程。欧拉第一个系统地把数学分析方法应用到力学中去，并用数学分析的语言重新表述了牛顿力学，使力学走进了分析时代。1736年欧拉写了著名的《力学》一书，书中用数学分析的语言重新叙述了牛顿《原理》一书的相关章节，被誉为是力学分析的基础。以后根据不同时期，不同国家的需要，欧拉还广泛涉及数学在物理学的各个领域的应用。其中1744年的《方法》一书的第二个附录，对最小作用量原理作了精辟的阐述，并建立了它的数学模型。这一模型直到今天仍然有其实际意义。

Heat
热　学

一、热力学基本规律
Fundamental Law of Thermodynamics

热物理学　thermal physics　热物理学（有时也简称热学）是研究有关物质的热运动以及与热相联系的各种规律的科学。热学研究的是由数量很大的微观粒子（例如 1 mol 物质中就包含有 6×10^{23}个分子）所组成的系统。在粒子数足够多的情况下，大数粒子（我们把数量级达到宏观系统量级的粒子称为大数粒子）组成的一个整体却存在着统计相关性。这种相关性迫使这个集体要遵从一定的统计规律。对大数粒子统计所得的平均值就是平衡态系统的宏观可测定的物理量。系统的粒子数越多，统计规律的正确程度也越高。相反，粒子数少的系统的统计平均值与宏观可测定量之间的偏差较大，有时甚至失去它的实际意义。正因为如此，热物理学有宏观描述方法（热力学方法）与微观描述方法[统计物理（含分子动理论）的方法]之分，它们分别从不同角度去研究问题，自成独立体系，相互间又存在千丝万缕的联系。

热力学　thermodynamics　热力学是热物理学的宏观理论，它从对物体的热现象的大量的直接观察和实验测量中所总结出来的普适的基本定律出发，应用数学方法，通过逻辑推理及演绎，得出有关物质各种宏观性质之间的关系，宏观物理过程进行的方向和限度等结论。热力学基本定律是自然界中的普适规律，只要在数学推理过程中不加上其他假设，这些结论也具有同样的可靠性与普遍性。这是热力学方法的最大优点。我们可用这种方法于任何宏观的物质系统，不管它是天文的、化学的、生物的……系统，也不管它涉及的是力学现象、电学现象…只要与热运动有关，热力学规律总应遵循。爱因斯坦总是以绝对信赖的心情寄希望于热力学，在他遇到难以克服的障碍时，常求助于热力学。爱因斯坦晚年时（1949 年）说过：“一个理论，如果它的前提越简单，而且能说明各种类型的问题越多，适用的范围越广，那么它给人的印象就越深刻。因此，经典热力学给我留下了深刻的印象。经典热力学是具有普遍内容的惟一的物理理论，我深信，在其基本概念适用的范围内是绝对不会被推翻的。”热力学是具有最大普遍性的一门科学，它非常不同于力学、电磁学，因为它不提出任何一个特殊模型，但它又可应用于任何的宏观的物质系统。

但是，热力学也有它的局限性。其一，它只适用于粒子数很多的宏观系统；其二，它主要研究物质在平衡态下的性质，它不能解答系统如何从非平衡态进入平衡态的过程；其三，它把物质看成连续体，不考虑物质的微观结构。它只能说明应该有怎样的关系，而不能解释为什么有这种基本关系。要解释原因，须从物质微观模型出发，利用分子动理论或统计物理方法予以解决。

工程热物理学　engineering thermophysics　也称工程热力学，是将热力学第一、第二定律应用于热力工程的一门新兴技术科学。它研究热力机械和热力设备中能量转化与传递的过程。重点研究先进热机内工作物质的压强、燃烧、膨胀、传热、传质等热物理现象的基本规律及工程应用，同时也对重大热工新技术（如热管）和新能源利用中的热物理问题进行研究。它在航空、宇航、电力、原子能利用等工业科技部门都有广泛的应用。

工程热力学　engineering thermodynamics　见“工程热物理学”。

热学　heat　对热学这一学科所包含的内容可能有数种不同理解；一是热物理学的简称；二是指热物理学中最基本的内容，如量热学（包括计温学）、热力学基础、分子动理论基础

和传热学基础等；三是指我国普通物理课程中的"热学"，它主要包括热力学、分子动理论、物性（液体与固体）及相变。

［热力学］系统 thermodynamical system 热力学研究的对象（简称系统）。它是由大量微观粒子组成的与周围环境发生相互作用的宏观的有限客体。而把系统以外的周围环境称为媒质或称外界。

媒质 medium 与热力学系统存在密切联系（这种联系可理解为作功、热传递和粒子数交往）的系统以外部分，也称为外界。

热力学参量 thermodynamic parameter 描述热力学系统的状态所必须的宏观物理量，也称热力学坐标，如压强、温度、体积、化学组成等。

热力学坐标 thermodynamic coordinates 见"热力学参量"。

热力学与经典力学的比较 comparision of thermodynamics with classical mechanics 热力学与经典力学都是宏观理论，经典力学的目的在于找出与牛顿定律相一致的、存在于各力学坐标（如位置矢量及速度矢量等）之间的一般关系。但是，热力学的注意力却指向系统内部。热力学的目的是要求出与热力学各个基本定律相一致的、存在于各热力学参量间的一般关系。正因为热力学与力学的目的不同，在热学中一般不考虑系统作为一个整体的宏观的机械运动。若系统在作整体运动，则常把坐标系建立在运动的物体上。

平衡态 equilibrium state 在不受外界条件影响下，经过足够长时间后系统必将达到一个宏观上看来不随时间变化的状态，这种状态称为平衡态。应注意，这里一定要加上"不受外界条件影响"的限制。例如，将一根均匀的金属棒的两端分别与冰水混合物及沸水相接触，这时有热流从沸水端流向冰水端，经足够长时间后，热流将达到某一稳定不变的数值，这时金属棒各处的温度也不随时间变化，但不同位置处的温度是不同的。整个系统（金属棒）没有均匀一致的温度，系统仍然处于非平衡态而不是平衡态。判别是否处于平衡态的简单方法是看系统中是否存在热流与粒子流。因为热流和粒子流都是由系统的状态变化或系统受到的外界影响引起的。

只有在外界条件不变的情况下同时满足力学、热学、化学平衡条件的系统，才不会存在热流与粒子流，才能处于平衡态。处于平衡态的系统，可以用不含时间的宏观坐标（即热力学参量）来描述它。也只有处于平衡态的物理上均匀的系统，才可能在以热力学参量为坐标轴所作的状态图（如 p-V 图、p-T 图）上以一个确定的点表示它的状态。只要上述三个平衡条件中有一个不满足，系统就处于非平衡态。

非平衡态 nonequilibrium state 力学、热学、化学三种平衡条件中至少有一个条件不满足的系统所处的状态。

热力学平衡 thermodynamic equilibrium 分为力学平衡、热学平衡（也称热平衡）与化学平衡三种平衡。力学平衡是指系统任意分割的各宏观部分都满足合力为零、合力矩为零；热学平衡是指系统任意分割的各宏观部分之间的温度均相等；化学平衡是指系统任意分割的各宏观部分之间其化学组成也要求完全相同。满足化学平衡的系统，其任一种粒子的化学势均应处处相等。

热［学］平衡 thermal equilibrium 见"热力学平衡"。

力［学］平衡 mechanical equilibrium 见"热力学平衡"。

化学平衡 chemical equilibrium 见"热力学平衡"。

定（常）态 stationary state 其系统各处热力学参量虽不随时间变化，但由于受外界条件影响而仍处于非平衡态的系统。也称定态、稳恒态、稳态。

稳（恒）态 steady state 即定常态。

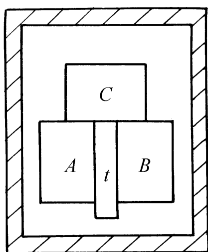
温度 temperature 表征物体冷热程度的物理量。要分析和研究问题，必须进一步建立温度的严格科学定义。

一、从宏观上对温度的定义是分别建立在热力学第零定律及热力学基本微分方程（即热力学第一、第二定律）基础上的。

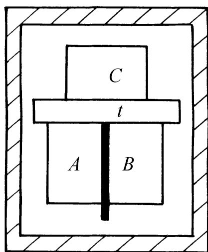
（一）热力学第零定律对温度的定义

（1）热力学第零定律

如果用绝热壁将物体 A 和 B 隔开，使 A 和 B 通过透热壁（t）分别与物体 C 热接触，如图(a)所示，经过足够长时间后，A 和 B 都将与 C 达到热平衡。若此时将透热壁改为绝热壁，如图(b)所示，实验表明只要在整个过程中不受到外界条件的影响。任一物体的状态都不会发生任何变化。这一实验事实说明，只要 A 和 B 同时与 C 处于热平衡，即使 A 和 B 没有热接触，它们仍然处于热平衡。这种规律被称为热平衡定律。热平衡定律是福勒（Fowler）于1939年提出的，因为它独立于热力学第一、第二、第三定律，但又不能列在第三定律之后，故称为热力学第零定律。



(a)



(b)

（2）热力学第零定律的物理意义及对温度的定义

热力学第零定律告诉我们，互为热平衡的物体之间必存在一个相同的特征——它们的温度是相同的。这既说明热接触为热平衡的建立创造条件，也说明温度是由系统内部热运动强弱状态所决定，或者说温度反映了系统内部热运动的主要特征。第零定律不仅给出了温度的概念，而且指出了判别温度是否相同的方法。由于互为热平衡的物体具有相同温度，在判别两个物体温度是否相同时，不一定要两物体直接热接触，而可借助一标准的物体分别与这两个物体热接触就行了。这个标准的物体就是温度计。第零定律只能说明物体之间有没有达到热平衡，即物体之间的温度是否相同，而不能比较尚未达到热平衡的物体之间温度的高低。

（二）从热力学基本微分方程出发对温度的定义

根据热力学第一、第二定律，可逆微过程有 $dU = TdS + Xdx$，其中 X 为广义力，dx 为广义位移。当系统不作功时 $dx = 0$，故 $dU = TdS$，由此可得：

$$T = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_x$$

这就是从热力学基本微分方程出发对温度的定义。例如，对仅有体积膨胀功的情况，则在体积不变时，系统在可逆过程中内能微小增量 dU 与熵微小增量 dS 之比就是系统在该状态的温度。这一温度表达式已被用来定义负温度，并判别负温度的高低。

二、从微观上对温度的定义

（一）温度是处于平衡态系统中的微观粒子热运动强弱程度的度量。这可以从理想气体的分子平均平动动能为

$$\bar{\varepsilon}_{平} = m\overline{v^2}/2 = 3kT/2$$

看出。其中$\overline{(v^2)}$为分子的均方速率。

（二）从玻尔兹曼分布出发对温度的定义

若处于平衡态的系统，在 ε_1 能级某个状态上的粒子数为 N_1，在 ε_2 能级的另一个状态上的粒子数为 N_2，则由玻尔兹曼分布可得

$$N_2 = N_1 \exp[-(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)/kT]$$

由此可得

$$T = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/k\ln(N_2/N_1)$$

这就是从玻尔兹曼分布出发对温度的定义。它表示处于平衡态的系统，在（无相互作用）粒子的任意两个不同能级的单粒子态上粒子数比值的对数 $\ln(N_2/N_1)$ 与粒子的能级之差 $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)$ 这两者之比，与系统的温度成反比。

热力学第零定律　zeroth law of thermody-

namics 见“温度”之“一”。

热平衡定律 thermal equilibrium law 见“温度”之“一”。

温标 temperature scale 温度的数值表示法,也是温度数值的定义。热力学第零定律不仅给出了温度的定义,也指出了利用温度计判别温度是否相同的方法。为了确定温度的数值,需要一个数值表示法,而且这一数值表示法不能仅适于一种温度计,还能适用于其他同类温度计,因而必须建立一个温度数值的标准,这就是温标。

温标分为三种类型:经验温标、绝对温标、国际实用温标。

经验温标 empirical temperature scale 一般说来,任何物质的任何属性,只要它随冷热程度发生单调的、显著的改变,它就可被用来计量温度。例如,在固定压强下液体(或气体)的体积,在固定体积下气体的压强,以及金属丝的电阻或低温下半导体的电阻等都随温度单调地、较显著地变化。从这一意义上来理解,可有各种各样的温度计,也可有各种各样的温标,这类温标称为经验温标。建立一种经验温标需要包含三个要素:(1)选择某种测温物质,确定它的测温属性(例如水银的体积随温度变化);(2)选定固定点(对于水银温度计,若选用摄氏温标,则以冰的正常熔点定为0℃,水的正常沸点定为100℃);(3)对测温属性随温度的变化关系(称作分度)作出规定(摄氏温标规定0℃到100℃间等分为100小格,每一小格为1℃)。显然,选择不同测温物质或不同测温属性所确定的经验温标并不严格一致。

测温物质 thermometric substance 被选择用来测量温度的物质。它的某一物理性质在某一温区范围内能随温度作较明显的、单调的变化,因而可被用来制作温度计,或建立经验温标。

测温属性 thermometric property 测温物质的特定性质,该性质在某一温区范围内能随温度作较显著的变化,因而可用这一性质来测量温度。

摄氏温标 Celsius temperature scale 是瑞典天文学家摄尔修斯(A.Celsius)于1742年改良了水银温度计后,建立的温标,它是以水银的热膨胀为测温属性所建立的经验温标。

华氏温标 Fahrenheit temperature scale 是德国物理学家华伦海特(D.G.Fahrenheit)于1714年确立的经验温标。他选用液体热膨胀为测温属性。把氯化氨、冰、水混合物的熔点定为0℉,冰的正常熔点定为32℉,并作均匀分度。由此定出水的正常沸点为212℉。华氏温标 t_F 与摄氏温标 t 间的换算关系为

$$t_F = [(9/5)\,t/℃ + 32]℉$$

理想气体温标 ideal gas temperature scale 以气体为测温物质,利用理想气体状态方程中体积(或压强)不变时压强(或体积)与温度成正比关系所确定的温标。理想气体温标是根据气体在极低压下所遵从的普遍规律来确定的,是利用气体温度计来定标的。

气体温度计分为定体及定压气体温度计两种。定体气体温度计的结构为:其下端为一容积固定的温泡,内中充有测温气体。将温泡与测温物体热接触,气体压强将随温度而变,其压强数值由与毛细管连通上端的压力计(或水银压力计)测出。定体气体温度计的分度是如此规定的:设 $T(p)$ 表示定体气体温度计与待测系统达到热平衡时的温度数值,由理想气体定律知

$$T(p) = \alpha p \quad (\text{体积不变}) \tag{1}$$

设该气体温度计在水的三相点时的压强为 p_{tr} 则

$$\alpha = \frac{273.16\text{K}}{p_{tr}} \tag{2}$$

将(2)式代入(1)式可知,当气体温度计压强为 p 时所测出的温度为

$$T(p) = 273.16\text{K}\cdot\frac{p}{p_{tr}}(\text{体积不变}) \tag{3}$$

但是,只有在 $p_{tr}\to 0$,即当温泡内气体质量趋于零时的气体才是理想气体,故还应在(3)式中加上极限条件

$$T(p) = 273.16\text{K}\cdot\lim_{p_{tr}\to 0}\frac{p}{p_{tr}} \quad (\text{体积不变})$$

定压气体温度计温泡内的压强固定不变,而与温泡相联通的毛细管的体积可变,由体积的

变化确定待测温度。

热力学温标 thermodynamic scale　是英国物理学家开尔文(Lord Kelvin,即 W. Thomson)根据热力学第二定律而引入的一种温标。从温标三要素知,选择不同测温物质或不同测温属性所确定的温标不会严格一致。事实上也找不到一种经验温标,能把测温范围从绝对零度覆盖到任意高的温度。为此应引入一种不依赖测温物质、测温属性的温标。正因为它与测温物质及测温属性无关,它已不是经验温标,因而称为绝对温标或称热力学温标。

由于热机效率定义为

$$\eta = \frac{W}{Q_1} = 1 - \left|\frac{Q_2}{Q_1}\right| \tag{1}$$

按卡诺定理,工作于两个温度不同的恒温热源间的一切可逆卡诺热机的效率与工作物质无关,仅与两个热源的温度有关,说明比值 $|Q_2|/|Q_1|$ 仅决定于两个热源的温度,即 $|Q_2|/|Q_1|$ 仅是两个热源温度的函数。为此开尔文建议建立一种不依赖于任何测温物质的温标。设由这一温标表示的任两个热源的温度分别为 θ_1 及 θ_2,在这两个热源间工作的可逆卡诺热机所吸、放的热量分别为 Q_1 及 Q_2。为了简单起见,可规定有如下关系

$$\left|\frac{Q_2}{Q_1}\right| = \frac{\theta_2}{\theta_1} \tag{2}$$

由此定义的 θ 就是热力学温标。因为可逆卡诺热机效率不依赖于任何测温物质的测温属性,而只与两个热源的温度有关,因而热力学温标可作为适用于任何测温范围内测温的"绝对标准",故又称为绝对温标。注意到在可逆卡诺热机效率公式中的温度都是用理想气体温标表示的,即

$$\eta = 1 - \left|\frac{Q_2}{Q_1}\right| = 1 - \frac{T_2}{T_1} \tag{3}$$

将式(3)与式(2)比较则有

$$\frac{\theta_2}{T_2} = \frac{\theta_1}{T_1} = \frac{\theta_{tr}}{T_{tr}} = A \tag{4}$$

(其中 θ_{tr}及 T_{tr}分别表示由热力学温标及理想气体温标所表示的水的三相点温度)这说明用热力学温标及用理想气体温标表示的任何温度的数值之比是一常数。为简单起见,1954 年国际度量衡会议上统一规定

$$\theta_{tr} = 273.16\ \mathrm{K} \tag{5}$$

这说明式(4)中常数 $A=1$,因而在理想气体温标可适用的范围内,热力学温标和理想气体温标完全一致,这就为热力学温标的广泛应用奠定了基础。

由热力学温标所确定的温度称为热力学温度,它的单位是开尔文,简称开。开尔文是国际单位制中七个基本单位之一,见"物理学中的单位制"。

绝对温标 absolute temperature scale　即热力学温标。见"热力学温标"。

开尔文温标 Kelvin temperature scale　即热力学温标。见"热力学温标"。

热力学温度 thermodynamic temperature　见"热力学温标"。

开 (K)　即开尔文,是温度的基本单位。见"热力学温标"。

国际实用温标 international practical temperature scale　是国际间协议性的温标,是世界上温度数值的统一标准。一切温度计的示值和温度测量的结果一般都应以国际实用温标来表示(其温度的数值或以开尔文温度表示或以摄氏温度表示)。我们知道,在理想气体温标能适用的范围内,热力学温标常以精密的气体温度计作为它的标准温度计。但实际测量中要使气体温度计达到高精度很不容易,它需要复杂的技术设备与优良的实验条件,还要考虑许多繁杂的修正因素。为了能更好地统一国际间的温度测量,以便各国自己能较方便地进行精确的温度计量,有必要制定一种国际实用温标。1927 年第七届国际计量大会通过了第一个国际温标 ITS-27,它是利用一系列固定的平衡点温度、一些基准仪器和几个相应的补插公式来保证国际间的温度计量在相当精确的范围内一致,并尽可能地接近热力学温标,使与热力学温标的误差不会超出精密气体温度计的误差范围。以后到 1960 年经修订而改名为国际实用温标(IPTS),1967 年又决定采用国际实用温标-1968(IPTS-68)。目前使用的是国际实用温标-1990(IPTS-90)。IPTS-90 选取了从平衡氢三相点(13.8033 K)

到铜凝固点(1357.77 K)间16个固定的平衡点温度。国际实用温标-1990可分别以热力学温度 T_{90} 及摄氏温度 t_{90} 表示，而 $t_{90}=T_{90}-273.16$ K。

为了将国际实用温标从定义变为现实的温度标准，许多国家都由本国的国家计量机构负责实现国际实用温标。中国计量科学院用一套实物(包括实现温标固定点的装置和基准温度计组)来复现国际实用温标，并以此作为中国温度计量的最高标准。同时还建立一套温度标准的传递检定系统。即一等和二等标准温度计作为逐级检定。一切新生产和使用中的温度计(包括测温仪表)，都应作定期检定，以保证其示值符合国际实用温标。

温度测量 temperature measurement 指使用测温仪器对物体的温度作定量的测量。温度测量实际上是对该物体的某一物理量的测量，该物理量应该在一定温度范围内随物体温度的变化而作单调的较显著的变化。然后，依据物理定律，由该物理量的数值来显示被测物体的温度。

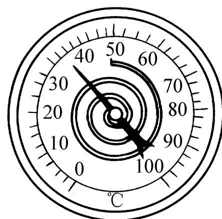
温度测量的方法，依据被测物理量的类别，可区分为：(1)膨胀测温法：利用物体的热膨胀现象来测定温度，如：玻璃温度计、双金属片温度计、定压气体温度计；(2)压力测温法：利用压强随温度变化的属性来测量温度，如压力表式温度计、定体气体温度计、蒸气压温度计；(3)电阻测温法：利用电阻随物体温度变化的属性来测定温度，如铂电阻温度计、半导体热敏电阻温度计；(4)温差电测温法：利用温差电现象，由测量温差电动势来测定温度，此即热电偶温度计；(5)磁学测温法：利用顺磁物质磁化率与温度的变化关系(即居里定律)来测量温度，称为磁温度计，它主要用于极低温度范围的温度测量；(6)声学测温法：利用理想气体中声速二次方与热力学温度成正比的原理来测量温度，常用声干涉仪来测量声速，它主要用于低温下温度测定；(7)噪声测温法：利用热噪声电平与热力学温度成正比(即尼奎斯特定理)的性质来测定温度。对于在很多温度计已失灵的mK温度范围，它可作为温度计量的基准仪器；(8)频率测温法：根据某些物体的固有频率 $\omega_0^2=1/LC$ 中的 L 或 C 随温度变化的关系来测定温度，称为频率温度计。由于在各种物理量的测定中，频率的测量准确度最高(其相对误差可小到 1×10^{-14})，因而可大大提高测量的精确度。如石英晶体温度计的分辨率可小到 10^{-4}℃或更小，且可以数字化，故得到广泛应用。(9)辐射测温法：是利用热辐射特性来测量温度的。常用的有三种类型：①以光谱辐射度为温度标志的光学高温计、光电高温计；②根据斯特藩-玻尔兹曼定律来测定温度的辐射高温计；③以测量物体的色温度来确定温度的比色高温计(也称为比率高温计或双色高温计)。

定压气体温度计 constant pressure gas thermometer 在理想气体压强不变情况下，利用气体的热力学温度与体积成正比关系来测温，见“理想气体温标”。

定体气体温度计 constant volume gas thermometer 见“理想气体温标”。

玻璃[液体]温度计 glass-steam(liquid)thermometer 以水银、酒精、甲苯等为测温液体的温度计。玻璃水银温度计的精度可做得较高，其测温范围为-30～600℃，用汞-铊合金代替汞，测温下限可延伸到-60℃。某些有机液体的测温下限可延伸到-150℃。液体温度计主要缺点是：测温范围较小；玻璃有热滞现象(玻璃膨胀后不易恢复原状)；若有液柱露出到被测物体体外，则要进行温度修正等。

双金属[片]温度计 bimetallic strip thermometer 把两种线膨胀系数不同的金属组合在一起，一端固定，当温度变化时，两种金属热膨胀不同，带动指针偏转以指示温度，这就是



双金属片温度计

双金属片温度计,如上页图所示。测温范围为$-80 \sim 600$℃,它适用于工业上精度要求不高时的温度测量。双金属片作为一种感温元件也可用于温度自动控制。当温度超过(或低于)某一温度时,双金属片弯曲而与某导体接触,电路接通,从而作自动控制。

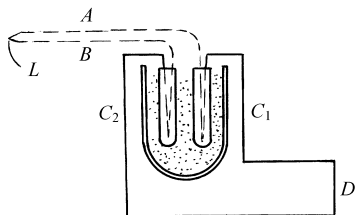
蒸气压温度计　vapour pressure thermometer

利用化学纯物质的饱和蒸气压随温度而变化的关系来测温的温度计。其结构与气体温度计(见"理想气体温标")相同。但蒸气压温度计温泡中所充气体在测温范围内为呈饱和蒸气状态。常用的蒸气压温度计的压强测量借助于压力表。

电阻温度计　resistance thermometer　根据导体电阻随温度而变化的规律来测量温度的温度计。最常用的电阻温度计都采用金属丝绕制成的感温元件,主要有铂电阻温度计和铜电阻温度计,在低温下还有碳、锗和铑铁电阻温度计。精密的铂电阻温度计是目前最精确的温度计,温度覆盖范围约为$14 \sim 903$K,其误差可低到万分之一摄氏度,它是能复现国际实用温标的基准温度计。我国还用一等和二等标准铂电阻温度计来传递温标,用它作标准来检定水银温度计和其他类型的温度计。

热电偶温度计　thermoelectric thermometer

根据塞贝克效应测量温度的装置。由两种金属导体 A 和 B 组成的回路,如果两个联接点(称为结点)处于不同温度 T_1 和 T_2,两结点间存在温差电动势。其温差电动势与两结点所在的温度范围、温度差的大小及与 A、B 材料种类有关。



如图表示利用塞贝克效应制作的温差热电偶温度计的测量装置。图中 A 和 B 表示两种不同材料的金属丝,它们分别与第三种材料——铜丝 C_1、C_2 构成参考结。这两个参考结均被置于放有冰水混合物(或液氮)的杜瓦瓶中。A 和 B 所构成的测量结 L 置于被测温度区域,C_1 与 C_2 的另一端分别被联接到电位差计 D 上,由 D 所测得的电动势就是该热电偶在被测温度与参考结温度间的温差电动势。由温差电动势与温度的对照表即可确定待测温度的数值。由于温差热电偶温度计灵敏度高,热容量小,反应快,可用作自动控制,因而是生产、科研中常用的测温手段。

磁学温度计　magnetic thermometer　见"温度测量"之(5),也称为磁温度计。

频率温度计　frequency thermometer　见"温度测量"之(8)。

声学温度计　acoustical thermometer　见"温度测量"之(6)。

噪声温度计　noise thermometer　见"温度测量"之(7)。

光学高温计　optical pyrometer　利用物体光谱辐射亮度来测量温度的温度计。最常用的光学高温计是隐丝式光学高温计及光电高温计。其基本原理是将待测光源的像的亮度与标准的发光物体(如灯丝)的亮度进行比较,从而确定其待测温度。

辐射温度计　radiation thermometer　是根据斯特藩-玻尔兹曼定律制成的温度计。它将被测物体在一定面积、一定立体角内的辐射能量收集到接收器中,接收器的温度将稳定于某数值,由接收器的温升可读出所对应黑体的温度,然后根据被测物体的材料及所处温度范围查得其吸收系数,从而定出被测物体的温度来。

热力学过程　thermodynamic process　系统的热力学状态变化的过程,简称过程。它有可逆过程与不可逆过程之分。可逆过程在状态图(如 $p-V$ 图、$p-T$ 图等)上可以一条实线表示。对于不可逆过程,由于某些中间状态不是平衡态,没有确定的状态参量,在状态图上不能以确定的点表示其状态,故不能在状态图上

以一条实线表示其热力学过程。

准静态过程 quasi-static process 热力学系统在状态变化时的一种理想过程,也是一种其变化足够缓慢,以至连续不断地经历一系列平衡态的过程。准静态过程在状态图上可以一条确定的实线表示,而非准静态过程则不能。按照平衡态的定义可知,系统只有同时满足力学、热学、化学平衡条件时的状态才是平衡态,但任何实际过程,其"满足"均有一定程度的近似,为此作如下具体规定:只要系统内部各部分(或系统与外界)间的压强差、温度差,以及同一成分在各处的浓度之间的差异分别与系统的平均压强、平均温度、平均浓度之比很小时,就可认为系统已分别满足力学、热学、化学平衡条件了。但是,实际上我们不易测出系统内部各部分的压强、温度及其浓度,为此我们必须引入一个新的物理量,利用这个物理量就可判断任一实际过程是否满足准静态的条件,这个物理量就是弛豫时间。

弛豫时间 relaxation time 处于平衡态的系统受到外界瞬时扰动后,经一定时间必能回复到原来的平衡态,系统所经历的这一段时间即弛豫时间。以 τ 表示。实际上弛豫时间就是系统调整自己随环境变化所需的时间。利用弛豫时间可把准静态过程中其状态变化"足够缓慢"这一条件解释得更清楚。只要系统状态变化经历的时间 Δt 与弛豫时间 τ 间始终满足 $\Delta t \gg \tau$,则这样的过程即可认为是准静态过程。弛豫时间与系统的大小有关,大系统达到平衡态所需时间长,故弛豫时间长。弛豫时间也与达到平衡的种类(力学的、热学的还是化学的平衡)有关。一般说来,纯粹力学平衡条件破坏所需弛豫时间要短于纯粹热学平衡或化学平衡破坏所需弛豫时间。例如气体中压强趋于处处相等靠分子间频繁碰撞交换动量。由于气体分子间的碰撞一般较频繁(标准状况下1个空气分子平均碰撞频率为 6.6×10^{9} 次/秒),加之在压强不均等时总伴随有气体的流动,故 τ 一般很小,对于体积不大的系统其 τ 约为 10^{-3} s,量级甚至更小。例如转速 $n=150$ 转/分的四冲程内燃机的整个压缩冲程的时间不足 0.2 s,与 10^{-3} s 相比尚大 2 个数量级,可认为这一过程足够缓慢,因而可近似地将它看做准静态过程。但是在混合气体中由于扩散而使浓度均匀化需要分子作大距离的位移,其弛豫时间可延长至几分钟甚至更大。

我们可利用声速来简便地判别 τ 的数量级,由于系统受到外界的力学扰动后,该扰动将以声波方式在系统内来回传播,我们可预期该声波传送几个来回后即可达到新的平衡态。若系统的线度为 L,声速为 c,则

$$\tau \propto \frac{L}{c}$$

例如:若 $L=0.3$ m,$c=300$ m/s,则 τ 为 10^{-3}s 的数量级。

可逆过程 reversible process 热力学系统在状态变化时经历的一种理想过程,定义为:系统从初态出发经历某一过程变到末态。若可以找到一个能使系统和外界都复原的过程(这时系统回到初态,对外界也不产生任何其他影响),则原过程是可逆的。若总是找不到一个能使系统与外界同时复原的过程,则原过程是不可逆的。

在力学及电磁学中所接触到的所有不与热相联系的过程都是可逆的。但是任何现象只要与热相联系,则其自发发生的任一过程必然是不可逆的。

在不可逆现象中时间的方向是确定的。因为时间不能倒过来变化,所以这类现象的逆过程不可能出现。一切生命过程都是不可逆的。在非生命的过程中也有一大类问题是不可逆的。这些可逆、不可逆的问题正是热学要研究的。只有无耗散的准静态过程才是可逆过程。两个条件只要有一条不满足,就不可能是可逆过程。利用这一规律很易解释:气体向真空自由膨胀及流体无抑制的膨胀的过程都始终不满足力学平衡条件(系统处处压强不等);物体在有限温度差下的热传递过程始终不满足热学平衡条件;在扩散、溶解、渗透及很多自发的化学反应中都始终不满足化学平衡条件,因而它们都是不可逆过程。若把满足不可逆过程的条件分解为四种不可逆性:力学不可逆性、热学不可逆性、化学不可逆性及耗散不可逆性,则任一过程中只要存在一种或一种以上的

不可逆性,这一过程必然是不可逆的。

不可逆过程　irreversible process　见“可逆过程”。

物态方程　equation of state　处于平衡态的系统,各热力学参量间满足的函数关系,也称为状态方程。任何物质,只要系统处于某一确定的平衡态,系统的热力学参量也将同时确定。若系统从一平衡态变至另一平衡态,它的热力学参量,也应随之改变。但是不管系统状态如何改变,对于给定的系统,处于平衡态的各热力学参量之间总存在确定的函数关系。例如化学纯的气体、液体、固体的温度 T_i 都可分别由各自的压强 p_i 及摩尔体积 $V_{i,m}$来表示,即

$$T_i = T_i(p_i, V_{i,m})$$

或

$$f_i(T_i, p_i, V_{i,m}) = 0 \qquad (1)$$

其中 i 分别表示气、液、固。我们把处于平衡态的某种物质的热力学参量压强、体积、温度之间所满足的函数关系称为物态方程或状态方程。故式(1)是分别描述化学纯的气态、液态、固态的状态方程。对于非化学纯物质,物态方程中还包含有化学组成这一类热力学参量。实际上并不仅限于气、液、固三种状态。有的系统,即使 V、p 不变,温度仍可随其他物理量而变。例如将金属丝突然拉伸,金属丝的温度会升高,这时虽金属丝的压强、体积均未变,但其长度 L 及内部应力 F 都增加了,说明金属丝的温度 T 是 F、L 的函数,或

$$f(F, L, T) = 0 \qquad (2)$$

式(2)称为拉伸金属丝的物态方程。还可存在其他各种物态方程。总之,描述平衡态系统各热力学量之间函数关系的方程均称为物态方程。物态方程中都显含有温度 T。物态方程常是一些由理论和实验相结合的方法定出的半经验公式。一些简单的物态方程也可在所假设的微观模型的基础上,应用统计物理方法导出。在热力学中,物态方程常作为已知条件给出。

状态方程　equation of state　即物态方程,见“物态方程”。

理想气体物态方程　equation of state of perfect gas　只要在足够宽广的温度、压强变化范围内进行比较精细的研究,就可发现,气体的物态方程相当复杂,而且不同气体所遵循的规律也有所不同。但在压强足够小、温度不太高也不太低的情况下,不同种类气体在物态方程上的差异可趋于消失,气体所遵从的规律也趋于简单。我们就把这种压强趋于零的极限状态下的气体称为理想气体。理想气体所满足的物态方程为

$$pV = \frac{m}{M_m}RT,\text{或 } pV = \nu RT \qquad (1)$$

式中 p、V、T、m、M_m 分别为气体的压强、体积、温度、质量、摩尔质量,R 为气体常数,ν 为气体物质的量。理想气体物态方程也称为理想气体状态方程。

克拉珀龙(物态)方程　Claperon equation of state　定质量理想气体从状态 1 变为状态 2 时其压强、体积、温度间满足的关系 $p_1V_1/T_1 = p_2V_2/T_2$,这可在理想气体物态方程中,令质量或物质的量为常数而得出。

盖·吕萨克定律　Gay-Lussac law　描述定质量气体当体积不变时其压强随温度作线性变化的规律:$p = p_0(1+\alpha t)$,其中 p_0 是在 0℃时的压强,α 是气体体积不变时的压强系数,t 为摄氏温度。由于理想气体的 α 的数值与气体种类及温度范围无关,且 $\alpha = 1/273.15$,故可得 $p = p_0(1+t/273.15)$,若令热力学温度 $T = (t+273.15)$ K,则 $p = p_0\alpha T$,说明定质量定体积理想气体的压强与热力学温度成正比。

查理定律　Charle law　描述定质量气体在压强不变时其体积随温度作线性变化的规律:$V = V_0(1+\beta t)$,其中 V_0 是在 0℃时的体积,t 为摄氏温度,β 是气体的膨胀系数。对于理想气体,β 与气体种类及温度范围无关,且 $\beta = 1/273.15$,这时 $V = V_0(1+t/273.15)$,若令热力学温度 $T = (t+273.15)$ K,则 $V = V_0\beta T$,说明定质量定压强理想气体的体积与热力学温度成正比。

玻意耳-马略特定律　Boyle-Mariotte law　描述定质量定温度理想气体,其任一状态的压强与体积的乘积为一常量的定律:$pV = C$,也称为玻意耳定律。这是玻意耳(R.Boyle)于 1662 年及马略特(E.Mariotte)于 1679 年先后从实

验上独立建立的定律。

普适气体常量 universal gas constant 也称普适气体常数、普适气体恒量，以 R 表示。只要将1摩尔标准状态下气体的数据代入理想气体物态方程，即可求得

$$R=8.31\ \mathrm{J\cdot K^{-1}\cdot mol^{-1}}。$$

混合理想气体物态方程 equation of state of mixed perfect gas 非化学纯理想气体所满足的物态方程。由于在压强趋于零时的任何气体都是理想气体，而与气体组分无关，若气体由 ν_1 摩尔 A 种气体，ν_2 摩尔 B 种气体等 n 种理想气体混合而成，则混合气体总的压强 p 与混合气体的体积 V、温度 T 间应有如下关系：

$$pV=(\nu_1+\nu_2+\cdots+\nu_n)RT \qquad (1)$$

$$p=\nu_1\frac{RT}{V}+\nu_2\frac{RT}{V}+\cdots+\nu_n\frac{RT}{V}$$
$$=p_1+p_2+\cdots+p_n \qquad (2)$$

式(1)称为混合理想气体物态方程。式(2)中的 $p_1,p_2,\cdots,p_n$ 分别是在容器中把其他气体都排走以后，仅留下第 $i(i=1,2,\cdots,n)$ 种气体时的压强，称为第 i 种气体的分压。式(2)称为混合理想气体分压定律，这是道尔顿(J. Dalton)于1801年在实验中发现的，故式(2)也称为道尔顿分压定律。

由式(2)可见，$p_1=\nu_1\dfrac{RT}{V}$，$p_2=\nu_2\dfrac{RT}{V}$，$\cdots$，$p_n=\nu_n\dfrac{RT}{V}$。它表示混合理想气体任一组分的分压都分别等于在该容器中将所有其他气体赶走，且温度保持原来温度时容器内气体的压强。另外，式(1)还可写为

$$V=\frac{\nu_1RT}{p}+\frac{\nu_2RT}{p}+\cdots+\frac{\nu_nRT}{p}$$
$$=V_1+V_2+\cdots+V_n \qquad (3)$$

式(3)称为混合理想气体分体积定律。它表示把任一组元的分子全部"抽出"容器，然后把它压缩，使其与原混合气体的压强与温度均分别相等，则该组元纯气体的体积称为分体积，而混合理想气体的体积必等于各组元分体积之和。

道尔顿分压定律 Dalton law of partial pressure 也称混合理想气体分压定律，见"混合理想气体状态方程"。

混合理想气体分体积定律 law of partial volume of mixed perfect gas 见"混合理想气体状态方程"。

理想气体 ideal gas 又称完全气体。从宏观上理解，理想气体是严格满足理想气体状态方程 $pV=\nu RT$ 的气体，式中 p、V、ν、T 分别为气体的压强、体积、物质的量和热力学温度，R 为普适气体常数。从微观上理解，理想气体是忽略分子固有体积、分子之间及分子与器壁间相互作用(碰撞瞬间的相互作用除外)的气体。严格说来，只有当气体压强趋于零时的气体才是理想气体，所以理想气体是一个理想模型。但它却有重要的实际意义，在数个大气压以下的、常温下的气体，一般都可看为理想气体，因为它与理想气体的性质已非常接近。

对于理想气体，其物态方程与气体种类无关。故对于混合理想气体，它满足道尔顿分压定律 $p=p_1+p_2+\cdots+p_n$。

由于理想气体忽略分子间相互作用，因而忽略分子间互作用势能，它只有动能。而分子平均动能只与热力学温度 T 有关，所以理想气体的内能 U 仅是 T 的函数，$U=U(T)$，这是焦耳从实验上得到的基本定律，称为焦耳定律。所以理想气体物态方程、道尔顿分压定律与焦耳定律都是表征理想气体性质的三个基本方程。

完全气体 perfect gas 即理想气体。

真实气体 real gas 也称实际气体，指不能忽略分子固有体积分子及分子与器壁间相互作用(碰撞瞬间除外)的气体。描述真实气体的压强、体积与温度间函数关系的方程称为真实气体物态方程。理想气体物态方程只有一种，但真实气体物态方程可有很多种，它们分别是从不同的角度，采用不同的模型得到的，其适用范围也可各不相同。真实气体物态方程中最基本的是范德瓦尔斯方程。

实际气体 real gas 也称真实气体，见"真实气体"。

非理想气体 imperfect gas 即"真实气体"。

真实气体状态方程 equation of state of real gas 见"真实气体"。

玻意耳温度 Boyle temperature 任一真实气

体均存在某一温度 T_B,在该温度下必能找到某一能满足 $pV_m=RT_B$ 的状态(其中 R 为普适气体常数,p 与 V_m 分别为该状态时气体的压强与摩尔体积),则 T_B 称为该真实气体的玻意耳温度。

范德瓦尔斯[物态]方程 van der Waals equation of state 是1873年荷兰物理学家范德瓦尔斯(van der Waals)在对理想气体两条基本假定(忽略分子固有体积、忽略除碰撞外的分子间相互作用力)分别做出两条重要修正后得到的,能描述真实气体行为的物态方程。对于1摩尔气体,其物态方程可表示为

$$\left(p+\frac{a}{V_m^2}\right)(V_m-b)=RT \tag{1}$$

其中 p、V_m、T 分别为真实气体的压强、摩尔体积、热力学温度、a 和 b 为与气体种类有关的常数。其中 b 是分子固有体积修正常数(它等于1mol气体分子固有体积的4倍),而(V_m-b)为将分子看做质点时分子能自由活动的空间,a 是分子间相互吸引力的修正常数,$\frac{a}{V_m^2}=\Delta p_i$ 是分子间吸引力所产生的压强修正值,称为内压强。

对于内压强这一修正值可作如下理解。由于每一分子均存在一分子作用半径 R_0(即只有当 $r\leqslant R_0$ 时才有较明显的分子相互吸引力),则每一分子均有一个以 R_0 为半径的作用球。显然,在气体内部的分子,其作用球内其他分子对该分子的吸引力相互抵消,其合力为零。这说明,在气体内部的压强与不考虑分子间作用力的理想气体压强是完全相同的,我们就把这一压强称为气体内部的压强,以 $p_内$ 表示。那么内压强修正怎么会出现呢? 由于测量压强的仪表实质上就是器壁的一部分,而气体内紧贴器壁有一层厚度为 R_0 的边界层。在边界层内的任一分子受到它的作用球内其他气体分子的吸引力是不能抵消的,其合力方向垂直于器壁并指向气体内部(设该方向为 $-x$ 方向)。现考虑有一沿 $+x$ 方向去碰撞器壁的分子,它在越过边界层时由于受到分子力合力的作用而使动量有所减少,因而碰壁时施于器壁的冲量减少,大量分子碰壁的平均效果为施于器壁的压强 p,显然 p 小于气体内部的压强(即理想气体压强),所减小数值即 Δp_i,故 $p=p_内-\Delta p_i$。很易证明 Δp_i 反比于气体的摩尔体积 V_m 的平方,其比例系数 a 为与气体种类有关的常数(即 $\Delta p_i=\frac{a}{V_m^2}$)。

综合分子固有体积修正 b 与分子间作用力而产生的气体内压强修正 Δp_i,考虑到理想气体压强即 $p_内$,理想气体体积即分子看做一个质点所能自由活动的空间 V_m-b,分别将它们代入到1mol气体的理想气体物态方程中,则有 $\left(p+\frac{a}{V_m^2}\right)(V_m-b)=RT$,此即范德瓦尔斯方程。若气体不是1mol,而是 ν 摩尔,则该方程可写为

$$\left(p+\frac{\nu^2 a}{V^2}\right)(V-\nu b)=\nu RT。 \tag{2}$$

对于压强不是很高、温度不是太低的真实气体,式(2)是一个很好的近似。

范德瓦尔斯方程特别重要的特点是它的物理图像十分鲜明,它的方程形式较为简单,它能同时描述气、液及气液相互转变的性质,也能说明临界点的特征,从而揭示相变与临界现象的特点。范德瓦尔斯方程对理论工作的贡献也很大。范德瓦尔斯理论的核心之一是将周围其他分子的吸引力以平均作用力来代替,这一想法看起来十分简单,但所产生的影响却十分深远。在20世纪相变理论中广为应用的平均场理论就是在这一想法的启发下发展起来的。例如解释铁磁体变为顺磁体的外斯(Weiss)"分子场理论",以及解释超流相变、超导相变、液晶相变的理论,都是平均场思想的光辉发展。1910年由于范德瓦尔斯方程的建立,范德瓦尔斯获得诺贝尔物理学奖。

昂内斯[物态]方程 Onnes equation of state 也称昂内斯方程,是卡默林·昂内斯(K. Onnes,他于1908年首次液化氦气,并于1911年发现超导电性)在研究永久性气体(氢、氦等)液化时,于1901年提出的描述真实气体的物态方程。它有按体积展开的昂内斯方程 $pV_m=A+B/V_m+C/V_m^2+\cdots$ 和按压强展开的昂内斯方程 $pV_m=A'+B'p+C'p^2+\cdots$ 两

种形式。其中 V_m 为摩尔体积，A、B、C…及 A'、B'、C'…分别为以体积展开和以压强展开的第一、第二、第三…位力系数，它们不仅与气体种类有关且都是温度的函数，其数值一般由实验确定。

昂内斯方程是真实气体在理想气体基础上按密度或压强的展开式，这种展开称为位力展开(在统计物理学中称为集团展开)。真实气体偏离理想气体愈远，则展开级数越高(对于理想气体，第二及以后所有位力系数均为零)。位力系数也可通过粒子间相互作用势能函数由统计物理算出。比较位力系数的实验值和理论值，是得到粒子间势能函数的一种重要方法。

位力系数 virial coefficient 见“昂内斯方程”。

维里系数 virial coefficient 即位力系数，见“昂内斯方程”。

固体物态方程 equation of state of solids 是把固体的体积在其绝对零度及零压强下的值 V_0 附近作泰勒级数展开所得的方程。由于固体的体膨胀系数 $\beta=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$ 及等温压缩系数 $\kappa_T=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ 均很小，故

$$V=V_0(1+\beta T-\kappa_T p)$$

其中 T 为热力学温度，κ_T 的典型值为 10^{-10}/Pa 的数量级，β 的典型值为 10^{-4}K 的数量级。

响应函数 responding function 响应函数是描述当系统的其他一些独立的状态参量在可控制条件下改变时，这个特定的状态参量是如何变化的。响应函数可分为热响应函数(如热容量)和力学响应函数(如压缩系数、压强系数以及磁化率等)。

压缩系数 compression coefficient 描述当压强变化时，体积如何变化的力学响应函数，它有等温压缩系数 κ_T 与绝热压缩系数 κ_S 之分，它们分别表示为

$$\kappa_T=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T=\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T$$

$$\kappa_S=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S=\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_S$$

式中下标 T 表示温度不变，下标 S 表示熵不变(即可逆绝热过程)，ρ 为系统的密度。

定体压强系数 pressure coefficient at constant volume 描述在体积不变时系统压强随温度变化的响应函数，以 γ_V 表示，$\gamma_V=(1/p)(\partial p/\partial T)_V$。

定容压强系数 pressure coefficient at constant volume 即定体压强系数。

热膨胀 thermal expansion 热膨胀是指气、液、固的体积或固体的线度在压强不变情况下随温度变化的现象，其体积改变称为体膨胀，线度改变称为线膨胀。热膨胀的性质可以体胀系数 β 及线胀系数 α 表示。若以 V、L 分别表示体积及线度，则

$$\beta=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p;\ \alpha=\frac{1}{L}\left(\frac{\partial L}{\partial T}\right)_p。$$

对于各向同性固体，由于不同方向上的 α 均相同，因而 $\beta=3\alpha$。对于各向异性固体，例如单晶体，其不同方向上线胀系数可能不同。下表列出了某些固体的线胀系数。

固体的线胀系数 α 表

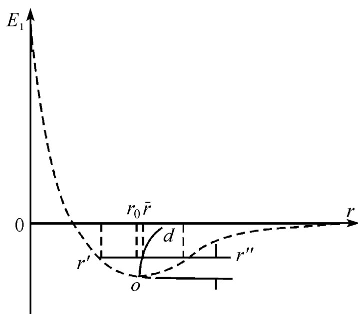
物　质	t/℃	$\alpha/\times10^{-6}$ ℃$^{-1}$
铝	25	25
金	25	14.2
银	25	19
铜	25	16.6
钨	0～300	4.5
铁	25	12.0
铂	25	9.0
黄铜(68 Cu,32 Zn)	25	18～19
殷钢(36 Ni,64 Fe)	0～100	0.8～12.8
玻璃(平均)	0～300	0.8～12.8
冰	0	5.27
金刚石	0～78	1.2
弹性橡胶	17～75	77

对固体的热膨胀现象可作如下解释：晶体中粒子都在振动，宏观上所看到的晶体线度是由微观粒子振动的平衡位置所决定的。如图表

示了两邻近粒子间的互作用势能曲线。其中横坐标 r 表示两邻近分子质心之间的平均距离。在 $T=0\mathrm{K}$ 时，由于量子效应，粒子在平衡位置 r_0 附近作振幅非常小的零点振动，这时两粒子质心间的距离为 r_0。随着温度的升高，粒子在零点振动能量基础上增加一个与温度有关的振动动能 E_k，粒子的总能量 E 是 E_k 和分子互作用势能 E_p 之和，这是一仅与温度有关的守恒量。在图中以 r 横轴下的第一条横线表示 E 是一守恒量。这时粒子来回振动于 r' 与 r'' 之间。只要振动的振幅不太大，可认为振动的“平衡位置”位于 r' 和 r'' 的平均值 $\bar{r}$ 处，且 $\bar{r}>r_0$，即

$$\bar{r}=\frac{1}{2}(r'+r'')>r_0$$

$\bar{r}>r_0$ 的原因在于分子势能曲线在势能谷部分的不对称性。粒子振动的“平衡位置”总是随着温度的升高，即总能量水平线的升高，而逐渐偏向右边，“平衡位置”轨迹如图中实线 OO' 所示。固体的热膨胀现象就是由势能曲线的不对称性（称为非谐相互作用）而产生。



既然晶格振动是晶体热容产生的决定因素，则热膨胀系数与固体热容间必有一定联系。格临爱森（Grüneisen）理论指出，膨胀系数与固体比热容成正比关系。它随温度的变化情况与固体热容随温度变化情况相似。对于每种固体，都有一个德拜特征温度 Θ，低于 Θ 温度时，膨胀系数随温度降低而急剧变小，并最后趋向于零，而远高于 Θ 温度时，膨胀系数为一常数。

由于液体和气体没有固定的形状，故液体和气体没有线胀系数，气体的体胀系数可由气体状态方程求得，对于液体，由于内部分子结构一般（但冰等物质为例外）要比固体疏松些（这可由液体密度比同温同压下同种固体密度小看出），故液体内部分子间存在空隙。这种空隙使液体有类似海绵的特征，所以液体的体胀系数比同种固体的稍大。

线［膨］胀系数　linear expansion coefficient
见“热膨胀”。

体［膨］胀系数　volume expansion coefficient
见“热膨胀”。

热容　heat capacity　物体在某一过程中升高或降低单位温度所吸收或放出的热量称为物体的热容，也称为热容量。若以 ΔQ 表示物体在升高 ΔT 温度的某过程中吸收的热量，则物体在该过程中的热容 C 定义为

$$C=\lim_{\Delta T\to 0}\frac{\Delta Q}{\Delta T}=\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}T}$$

其单位为 J/K。每摩尔物体的热容称为摩尔热容 C_m，单位质量物体的热容称为比热容 c，则

$$C=\nu C_m,\ C=mc$$

物体升高相同的温度所吸收的热量不仅与温度差及物体的性质有关，也与具体过程有关。在等体过程中气体与外界没有功的交往，所吸收热量全部用来增加内能；在等压过程中吸收热量除用来增加内能外，还需使气体膨胀对外作功，所以定压热容总比定体热容大（至少相等）。一般常以 C_V、C_p、$C_{V,m}$、$C_{p,m}$、c_V、c_p 分别表示物体的定体热容、定压热容、摩尔定体热容、摩尔定压热容及定体比热容、定压比热容。则

$$C_p=\lim_{\Delta T\to 0}\left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_p$$

$$C_V=\lim_{\Delta T\to 0}\left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_v$$

由热力学第一定律 $\mathrm{d}U=\mathrm{d}Q-p\mathrm{d}V$ 知，

$$C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V\qquad C_p=\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$$

其中 $H=U+pV$ 称为焓，H 和 U 均为系统的态函数，而 c_p、c_V 均可由实验测出。由于实验装置中固定压强较为容易，故通常测量的是定压热容，而定体热容是通过测量体膨胀系数 β

及等温压缩系数 κ_T，利用

$$C_p - C_V = \frac{VT\beta^2}{\kappa_T}$$

求出。对于固体，由于 $(C_p - C_V)/C_V \ll 1$，常不区分 C_p 或 C_V 而以 C 表示其热容。

各种不同的系统，在一定条件下都有各自的热容。例如对于拉伸的金属丝与弦，有 C_F 及 C_L，前者张力恒定，后者长度恒定；对于表面系统，有 C_σ 及 C_A，前者表面张力恒定，后者表面积恒定；对电介质系统，有 C_E 及 C_P，前者电场强度恒定，后者电极化强度恒定；对顺磁系统，有 C_H 及 C_M，前者磁场强度恒定，后者磁化强度恒定。

对于单元二相系，还可引入二相平衡热容的概念，以 C_1^2 表示相 1 的二相平衡热容。它表示相 1 在与相 2 维持相平衡条件下，升高单位温度所吸收的热量；同样 C_2^1 表示相 2 在与相 1 维持相平衡条件下升高单位温度所吸收的热量。

热容这一宏观物理量与微观粒子的无规热运动有关，因而与物质微观结构密切联系。当物质出现相变时，由于其微观结构发生突然改变，因而其 C_p 随温度变化曲线发生异常（称为比热反常）。C_p-T 曲线可用于检测相变是否发生，及发生的是一级相变还是高阶相变（也称连续相变）。

定压热容 heat capacity in constant pressure 见“热容”。

定体热容 heat capacity in constant volume 见“热容”。

定容热容 heat capacity in constant volume 即定体热容，见“热容”。

比热[容] specific heat capacity 见“热容”。

两相平衡热容 heat capacity in two phases equilibrium 见“热容”。

两相平衡比热 specific heat capacity in two phases equilibrium 即两相平衡比热容，见“热容”。

功 work 是力学相互作用过程中所转移的能量。

（一）在力学中知道，在外力作用下，物体的平衡将被破坏，在物体运动状态发生改变的同时，可伴随有能量的转移（例如重物被举高一定的高度），其所转移的能量是功。而热力学系统达到平衡态的条件却是同时满足力学、热学和化学平衡条件。我们可将力学平衡条件被破坏时所产生的对系统状态的影响称为“力学相互作用”。在力学相互作用过程中系统和外界之间转移的能量就是功。热力学认为，力学相互作用中的力是一种广义力，它不仅包括机械力（如压强、金属丝的拉力、表面张力等），也包括电场力、磁场力等。所以功也是一种广义功，它不仅包括机械功，也应包括电场功、磁场功等。还应注意：

（1）只有在系统状态变化过程中才有能量转移，系统处于平衡态时能量不变，因而没有作功。功与系统状态间无对应关系，说明功不是状态参量。

（2）在一般情况下，热力学系统可通过多种形式与外界转移能量，其转移的能量统称为广义功，也就是说，只有在广义力（例如压强、电动势等）作用下产生了广义位移（例如体积变化和电量迁移）后才作了功，这是与在力学中“只有当物体受到作用力并在力的方向上发生位移后，力才对物体作功”是一样的。

（3）在非准静态过程中，由于系统内部压强处处不同，且随时在变化，很难计算系统对外作的功。

（4）功是过程的改变量，它与状态变化过程有关，因而功不是态函数，不满足全微分条件。

（二）广义功的表达式 ① $p-V$ 系统的元功 $đW = -p\mathrm{d}V$； ②拉伸金属丝（或弦）的元功 $đW = F\mathrm{d}L$； ③表面张力的元功 $đW = \sigma\mathrm{d}A$； ④可逆电池的元功 $đW = \varepsilon\mathrm{d}q$； ⑤电介质的元功 $đW = E\mathrm{d}P$； ⑥顺磁介质的元功 $đW = H\mathrm{d}M$。其中 p、F、σ、ε、E、H 分别表示压强、张力、表面张力、电源电动势和电场强度及磁场强度；V、L、A、q、P、M 分别表示体积、长度、表面积、电量、电极化强度与磁化强度。

广义功的一般表达式为 $đW = X_i\mathrm{d}x_i$，其中 X_i 称为广义力，如 $-p$、F、σ、ε、E、H 等。x_i 称为广义坐标，如 V、L、A、q、p、M，其微分元称为微小广义位移。一般系统可同时存在多

种广义功，这时总的广义元功为 $đW = \sum_i X_i \mathrm{d} x_i$。

广义功 generalized work　见“功”。

广义坐标 generalized coordinate　为了确定物体(或物体系)的位置或系统的状态，根据问题的需要而任意选择的独立变数。其广义坐标数在力学中称为自由度，在热学中称之为自由度数。

强度量 intensive quality　当系统在相同状态下质量扩大一倍后，其数值仍不变的物理量，如压强、表面张力、电场强度等。

广延量 extensive quality　当系统在相同状态下质量扩大一倍后，其数值也扩大一倍的物理量，如体积、电量等。

热量 quantity of heat　当系统状态的改变来源于热学平衡条件的破坏，也即来源于系统与外界间存在温度差时，我们就称系统与外界间存在热学相互作用。作用的结果有能量从高温物体传递给低温物体，这时所传递的能量称为热量。热量和功是系统状态变化中伴随发生的两种不同的能量传递形式，是不同形式能量传递的量度，它们都与状态变化的中间过程有关，因而不是系统状态的函数。一个无穷小的过程中所传递的热量只能写成 $đQ$ 而不是 $\mathrm{d}Q$，因为它与功一样，不满足多元函数的全微分条件。这是功与热量类同之处。功与热量的区别在于它们分别来自不同的相互作用。功由力学相互作用所引起，只有产生广义位移时才伴随功的出现；热量来源于热学相互作用，只有存在温度差时才有热量传递。

热质说 Caloric theory　历史上关于热的本质的一种错误观点。“热质说”认为热与物质一样是不生不灭的，它没有重量而可透入一切物体中。一个物体是“热”还是“冷”，由它所含热质的多少决定。较热的物体含有较多热质，较冷的物体含有较少热质，冷热物体相互接触，会发生热质从较热物体流向较冷物体的现象。

认为热是物质的最早说法见于古希腊德谟克里特(Democritus)等著作中，以后又受到伽桑狄(P.Gassendi)的支持。在哈雷大学的施塔耳(Stahl)引入“燃素”的错误理论后，热质说渐占统治地位。虽然“热质说”理论是错误的，但在当时确能利用它来简易地解释不少热学现象，对科学发展起了推动作用，特别是从1714年华伦海特(D.G.Fahrenheit)改良了温度计并建立华氏温标，热学开始走上实验道路之后。在“热质说”的支持下，布莱克(J.Black)于1755年发现了冰量热器。他认为，热质与冰结合成水，热质再与水结合成汽，从而发现了比热和潜热。布莱克将热称为热的份量，温度称为热的强度，是他首次澄清了热和温度这两个相互混淆的概念。受到布莱克辅导的瓦特(J.Walt)从理论上分析了蒸汽机的主要缺陷，从而改进了蒸汽机。傅里叶(J.B.J.Fourier)于1822年在《热的分析理论》一文中利用“热质说”建立了傅里叶定律。卡诺(S.Carnot)于1824年从“热质说”出发得到了卡诺定理。

第一个利用实验事实来批判热质说错误观点的是英国伯爵朗福德(Rumfford)，他在1798年发表论文，论述用钝钻头加工炮筒时发现摩擦生的热是“取之不尽的”，从而否定了热质守恒的错误观点。他由此得出结论：热是运动。次年戴维(H.Davy)做了两块冰相互摩擦而使之完全熔化的实验。水的容热本领大于冰，即摩擦后物质的容热本领变大了。显然这和热质说相矛盾，从而支持了热是运动的学说。但是热是能量转移的一种形式的正确观点的建立最终将决定于热与机械运动之间相互转化的思想被人们普遍接受，并测定出热功当量的数值，这就为热力学第一定律的建立奠定坚实基础。

卡 calorie　计算热量的单位，以 cal 表示，它等于标准大气压下每一克纯水升高 1 ℃所吸收的热量。由于水的比热容随温度不同而有微小差异，因而有各种不同的卡，如 15 ℃卡、4 ℃卡、20 ℃卡和平均卡等。一般教科书中均用 15 ℃卡，它定义为每 1 克无空气的纯水在 101.325 kPa 的恒压下，温度从 14.5 ℃升到 15.5 ℃所吸收的热量。此外还有热化学卡(cal_{th})和国际蒸汽表卡(cal)，所对应的能量值分别为 4.1840 J 和 4.1868 J。卡是由于历史的原因而引入的现已被废除的单位。国际单

位制中规定热量的单位是焦耳,而不是卡,见“热功当量”。

热力学第一定律 first law of thermodynamics 热力学的基本定律之一,是能量守恒与转化定律在一切与热相联系的宏观过程中的应用。能量守恒与转换定律的内容是:自然界一切物体都具有能量,能量有各种不同形式,它能从一种形式转化为另一种形式,从一个物体传递给另一个物体,在转化和传递中能量的数量不变。

能量守恒原理是19世纪物理学的最伟大的概括。

历史上第一个发表论文,阐述能量守恒原理的是迈耶(Mayer),1840年他在从荷兰去爪哇的船上当医生。到爪哇时为治疗肺炎他用当时的治疗方法为他们放血,发现静脉血非常红,这种生理现象启发他思考其中的道理。他根据拉瓦锡的理论,动物的热是燃烧过程中产生的,即动物的体温是血液和氧结合的结果。热带气温高,维持体温消耗的氧较少。血液中剩下了许多未使用的氧,所以血鲜红。他认为燃烧热的发生源不是筋肉而是血液,由此他产生了热功当量的思想。1842～1848年他连续发表论文,具体论述了在自然界中普遍存在的机械能、热能、化学能、电磁能、光和辐射能之间的相互转化。1842年迈耶在《论无机界的力》一文中曾提出了机械能和热量相互转换的原理,并由空气的定压摩尔热容与定体摩尔热容之差 $C_{p,m}-C_{V,m}=R$(称为迈耶公式)计算出热功当量的数值。1845年出版的《论有机体的运动和新陈代谢》一书中,描述了运动形式转化的25种形式。

焦耳从1840年起做了大量有关电流热效应和热功当量方面的实验。他先后采用磁电机实验、桨叶搅拌实验、水通过细管实验、转动水轮推动流体实验等方法测定热功当量。尽管所用方法、设备、材料各不相同,但结果都相差不远;并且随着实验精度提高而趋近于同一数值,焦耳从而得出结论:热功当量是一普适常数,与作功无关。最后,他将多年的实验结果写成论文发表在英国皇家学会《哲学学报》1850年140卷上。他精益求精,直到1878年还有他测量结果的报告。他近40年的研究工作,为热运动与其他运动的相互转换以及运动守恒等问题,提出了无可置疑的重要证据。焦耳不仅是热力学第一定律的另一发现者,而且他以40年的精力精益求精地进行实验研究的精神也为后人提供很好的范例。

焦耳是通过大量严格的定量实验精确测定热功当量来证明能量守恒概念的;而迈耶则从哲学思辨方面阐述能量守恒概念。后来德国生理学家、物理学家亥姆霍兹(H. von Helmholtz)发展了迈耶和焦耳等人的工作,讨论了当时的力学的、热学的、电学的、化学的各种现象,严谨地论证了在各种运动中其能量是守恒的定律。但直到1850年科学界才公认热力学第一定律是自然界的普适定律,以后也都公认迈耶、焦耳、亥姆霍兹是热力学第一定律的三位独立发现者。

热功当量 mechanical equivalent of heat “焦耳”与“卡”之间的关系的一个普适常量,也即1卡的热量相当于多少焦耳的功(或能量)。实际上“卡”有国际蒸汽表卡 cal 和热化学卡 cal_{th}之分,故

$$1\ cal = 4.1868\ J \quad 1\ cal_{th} = 4.1840\ J$$

由于有以上关系,就可以同一单位“焦耳”来度量功、能量、热量。这时“卡”这一热量单位可不需要。故在国际单位制中已废除“卡”这一单位。

能量守恒与转换定律 law of conservation and transformaition of energy 见“热力学第一定律”。

内能 internal energy 物质系统中由其内部状态决定的能量。在力学中,外力对系统作功,引起系统整体运动状态的改变,使系统总机械能(包括动能和外力场中的势能)发生变化,物体的动能和势能是描述物体运动状态的函数。而在热学中,媒质对系统的作用使系统内部状态发生改变,它所改变的能量发生在系统内部,则内能是系统内部所有微观粒子(例如分子、原子等)的微观的无序运动动能以及总的相互作用势能两者之和。内能是状态函数,处于平衡态系统的内能是确定的。内能与系统状态间有一一对应的关系。内能是一广

延量。一般情况下,系统的内能可表示为系统的温度和外参量的函数。

从热力学考虑,也必须引入内能这一概念。将能量守恒与转化定律应用于热效应就是热力学第一定律,但是能量守恒与转化定律仅是一种思想,它的发展应借助于数学。马克思讲过:一门学科只有在能成功地运用数学时,才算是真正的发展了。数学还可给人以公理化方法,即选用少数概念和不证自明的命题作为公理,以此为出发点,层层推论,建成一个理论体系。热力学也理应这样的发展起来。所以应该建立热力学第一定律的数学表达式。第一定律描述功与热量之间的相互转换,而功和热量都不是系统状态的函数,我们应找到一个量纲也是能量的、与系统状态有关的函数,把它与功和热量联系起来,由此说明功和热量转换的结果其总能量还是守恒的。这个函数就是内能 U。

在热力学中,内能函数是通过内能定理引入的。从能量守恒原理知:系统吸热,内能应增加;外界对系统作功,内能也增加。若系统既吸热,外界又对系统作功,则内能增量应等于这两者之和。为了证明内能是态函数,也为了能对内能作出定量化的定义,先考虑一种较为简单的情况——绝热过程,即系统既不吸热也不放热的过程。焦耳作了各种绝热过程的实验,其结果是:一切绝热过程中使水升高相同的温度所需要的功都是相等的。这一实验事实说明,系统在从同一初态变为同一末态的绝热过程中,外界对系统作的功是一个恒量,这个恒量就被定义为内能的改变量,即:

$$U_2 - U_1 = W_{绝热}$$

因为 $W_{绝热}$仅与初态、末态有关,而与中间经历的是怎样的绝热过程无关,故内能是态函数。上式称为内能定理。

需要说明:

(1)我们这里只从绝热系统和外界之间功的交往来定义内能,这是一种宏观热力学的观点,它并不去追究微观的本质。从微观结构上看,系统的内能应是如下能量之和:①分子的无规热运动动能;②分子间互作用势能;③分子(或原子)内电子的能量;④原子核内部能量。在热物理学中,通常主要研究其中的①、②两项或①、②、③项。

(2)确定内能时可准确到一个不变的加数 U_0,对一个系统进行热力学分析时所涉及的不是系统内能的绝对数值,而是在各过程中内能的变化,其变化量与 U_0 无关,故常可假设 $U_0 = 0$。

(3)热学中的内能只用于描述系统的热力学与分子物理学的性质,它一般不包括作为整体运动的物体的机械能。

在引入了内能函数以后,热力学第一定律可表示为

$$\Delta U = Q + W$$

其中 ΔU 表示系统从初态变为末态过程中的内能增量,而 Q 和 W 分别表示在这一过程中从外界吸收的热量与外界对系统作的功,对于准静态过程有

$$\mathrm{d}U = -p\mathrm{d}V + đQ$$

内能一般被看做 T、V 的函数,故定体热容

$$C_V = \lim_{\Delta Q \to 0}\left(\frac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$$

而 $\mathrm{d}U = (\partial U/\partial T)_V \mathrm{d}T + (\partial U/\partial V)_T \mathrm{d}V = C_V \mathrm{d}T + (\partial U/\partial V)_T \mathrm{d}V$,故

$$U = \int C_V \mathrm{d}T + \int\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T \mathrm{d}V + U_0$$

内能是广延量,故有摩尔内能 U_m 与比内能 u 之分,它们与物体的内能 U 之间有下述关系:

$$U = \nu U_m; \quad U = mu$$

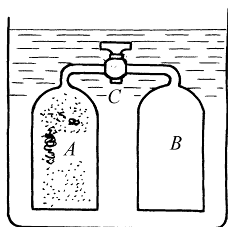
其中 m 与 ν 分别为物体的质量与物质的量。

内能定理 internal energy theorem 　见“内能”。

第一类永动机 perpetual motion machine of the first kind 　不需要消耗任何燃料和动力即能源源不断地对外作有用功的理想动力机械。若能存在这种永动机,则可不需任何能源即能无中生有地得到无限多的动力,这是违背能量守恒与转换定律(即热力学第一定律)的,故热力学第一定律也可表述为“第一类永动机是不可能存在的”。

焦耳气体自由膨胀实验 Joule experiment of free expansion of gas 　焦耳于 1845 年完成的研究气体内能的实验,也称为焦耳实验,其示

意图如图所示。气体被压缩在左边容器 A 中，



右边容器 B 是真空。两容器用较粗的管道联接，中间有一活门可以隔开。整个系统浸在水中。打开活门让气体从容器 A 中冲出进入 B 中而作自由膨胀，然后测量过程前后水温的变化。在 A 中气体冲入 B 中并最后达平衡态过程中，气体没有对外作功(即 $W=0$)，也来不及与外界交换热量，故 $Q\simeq 0$。按热力学第一定律，在自由膨胀过程中恒有

$$U_1(T_1、V_1) = U_2(T_2、V_2)$$

其中 U_1、T_1、V_1 及 U_2、T_2、V_2 分别为自由膨胀前后气体的内能、温度与体积。这说明自由膨胀是等内能过程。一般说来，当体积改变时温度会有所变化，这称为焦耳效应，人们把等内能过程中系统温度随体积的变化率称为焦耳系数 λ，即：

$$\lambda = \left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_U = -\frac{1}{C_V}\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T$$

其中 C_V 是定体热容。在焦耳当时的测量精度下测出水温变化为零，即气体的内能仅是温度函数与体积无关。由于所测气体十分接近于理想气体，因而 $U=U(T)$ 被看做理想气体一个重要性质，称为焦耳定律(后来的许多实验以更高的精度证实此规律的正确性)。这也间接地说明了，很多在常温下数个大气压以下的气体都可看做理想气体。焦耳定律与理想气体状态方程及道尔顿分压定律都被并列看做理想气体基本性质。

自由膨胀 free expansion 气体通过口径较大的管道或打开的隔板无阻碍地自由流入到真空空间中的膨胀过程，正如在“焦耳气体自由膨胀实验”中所介绍的。在自由膨胀过程中，气体与外界无热量和功的交往，因而是等内能过程。

焦耳定律 Joule law 见“焦耳气体自由膨胀实验”。

焦耳系数 Joule’s coefficient 见“焦耳气体自由膨胀实验”之(2)式。

焓 enthalpy 也称为热焓，是热力学中为便于研究等压过程所引入的一个态函数，以 H 表示，定义为

$$H = U + pV \tag{1}$$

式中 U、p、V 分别表示系统的内能、压强与体积，习惯把焓看做 T、p 的函数。由热力学第一定律数学表达式 $\mathrm{d}U=-p\mathrm{d}V+\text{đ}Q$ 知，在等压过程中所吸收热量

$$(\text{đ}Q)_p = \mathrm{d}(U+pV)_p = (\mathrm{d}H)_p \tag{2}$$

它表示在等压过程中吸收的热量等于焓的增量(假定系统仅有体积膨胀功，而无其他形式的功)。由于相变过程都是在等压下进行的，故相变潜热就是在相变前后两相焓的变化。同样，若化学反应是在等压下进行的，则这类化学反应的反应热 ΔH 是化学反应前后总焓的变化，它称为反应焓。由于定压热容 $C_p=\lim\limits_{\Delta T\to 0}\left(\dfrac{\Delta Q}{\Delta T}\right)_p$，故对于没有发生相变，没有化学反应时的 C_p 可由式(2)求得

$$C_p = \left(\frac{\text{đ}Q}{\mathrm{d}T}\right)_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$$

而 $\mathrm{d}H=(\partial H/\partial T)_p\mathrm{d}T+(\partial H/\partial p)_T\mathrm{d}p=C_p\mathrm{d}T+(\partial H/\partial p)_T\mathrm{d}p$，故

$$H = \int C_p\mathrm{d}T + \int\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_T\mathrm{d}p + H_0$$

因为地球表面上的物体一般都处在恒定大气压下，而物态变化以及不少的化学反应都在定压下进行，且测定定压比热容在实验上也较易于进行。所以在实验及工程技术中，焓与定压热容要比内能与定体热容有更重要的实用价值。在工程上常对一些重要物质在不同温度、压强下的焓值数据制成图表以供查阅，这些焓值都是指与参考态(例如对某些气体可规定为标准状态)的焓值之差。对于等压过程，可通过查焓值求出所吸收的热量。

对于无体积膨胀功，但有其他形式的功的系统，也可定义其他形式的焓，例如磁介质系统

有所谓磁焓

$$H_{磁} = U - HM$$

其中 H 和 M 分别为磁介质的磁场强度与磁化强度。

因为焓是广延量，与内能一样可定义摩尔焓 H_m 及比焓（单位质量的焓）h，即

$$H = \nu H_m, \quad H = mh$$

其中 ν 与 m 分别为系统的物质的量与质量。

磁焓 magnetic enthalpy 定义磁焓 $H_{磁} = U - HM$，其中 U、H、M 分别为磁介质系统的内能、磁场强度与磁化强度，在这种系统中不考虑除磁化功以外的其他形式的功。

热焓 thermal enthalpy 体积可变系统所具有的焓 H，即 $H = U + pV$，也就是通常所指的焓，见“焓”。

理想气体热容 heat capacity of ideal gas

（1）定体热容　因为理想气体内能仅是温度函数，等体过程中吸的热等于内能增加，故摩尔定体热容 $C_{V,m} = (đQ/dT)_V = dU_m/dT$。

（2）定压热容　理想气体摩尔焓 $H_m = U_m + RT$ 仅是温度函数，故理想气体摩尔定压热容 $C_{p,m} = dH_m/dT$

（3）迈耶公式　由上述 $C_{V,m}$、$C_{p,m}$ 的表达式及 $H_m = U_m + RT$ 可得 $C_{p,m} - C_{V,m} = R$，称为迈耶公式。一般说来，理想气体的 C_p、C_V 可能是温度的函数，但其差值却一定是常数。

（4）多方热容　对于 $pV_m^n =$ 常数的多方过程也可写为 $TV_m^{n-1} =$ 常数，只要对后面的等式两边取微分后并同除以 dT，可得

$$\left(\frac{\partial V_m}{\partial T}\right)_n = -\frac{1}{n-1} \cdot \frac{V_m}{T} \qquad (1)$$

式(1)左边表示多方指数为 n 的多方过程在 $V-T$ 图中曲线的斜率。若在理想气体热力学第一定律表达式 $C_{V,m}dT = đQ - pdV_m$ 两边同除以 dT，并令多方过程中的 $đQ = (dQ)_n$，再令 $(đQ/dT)_n = C_{n,m}$ 为多方过程中的热容（称为多方摩尔热容）。将式(1)代入后可得

$$C_{n,m} = C_{V,m}\left(\frac{\gamma - n}{1 - n}\right) \qquad (2)$$

其中 $\gamma = C_{p,m}/C_{V,m}$ 称为比热容比或称绝热指数。由式(2)可见 $C_{n,m}$ 可为负，这称为多方负热容。

比热容比 ratio of specific heat capacity 指系统定压热容与定体热容之比，以 γ 表示 $\gamma = C_p/C_V$。对理想气体，γ 是一常数，称为绝热指数（因为在绝热过程中有 $pV^r =$ 常数）。单原子理想气体的 $\gamma = 5/3$，常温下常见双原子气体的 $\gamma = 7/5$。

绝热指数 adiabatic exponent 即“比热容比”。

迈耶公式 Mayer formula 即理想气体的 $C_{p,m} - C_{V,m} = R$，见“理想气体热容”。

等温过程 isothermal process 温度始终不变的准静态过程。对于理想气体其温度不变即内能不变，由第一定律知 $đQ = -đW = pdV$，从而可得 $Q = -W = \nu RT\ln V_2/V_1$，其中 ν、T、V_2 及 V_1 分别表示系统的物质的量、温度及末态、初态体积。

等体过程 isochoric process 体积始终不变的准静态过程，也称等容过程。等体即无功，这时系统吸热即内能增加，$Q = \int_{T_1}^{T_2} \nu C_{V,m} dT$。其中 ν、$C_{V,m}$、T_1 及 T_2 分别为系统的物质的量、定体摩尔热容、初态及末态温度。

等容过程 isochoric process 即“等体过程”。

等压过程 isobaric process 压强始终不变的准静态过程。等压过程中吸的热等于系统焓的增加，故 $Q = \nu\int_{T_1}^{T_2} C_{p,m} dT = H_{m,2} - H_{m,1}$，其中 ν，$C_{p,m}$、$H_{m,2}$ 及 $H_{m,1}$ 分别表示系统的物质的量、定压摩尔热容、终态及初态的摩尔焓。

绝热过程 adiabatic process 始终不吸放热量的准静态过程，这时外界对系统作的功等于其内能增加。对于理想气体有 $\nu C_{V,m}dT + pdV = 0$，其中 ν、$C_{V,m}$ 为系统物质的量及摩尔定体热容，将 $p = \nu RT/V$ 代入上式积分，并令 $\gamma = C_{p,m}/C_{V,m}$ 可得 $TV^{\gamma-1} =$ 常数，利用理想气体状态方程还可得

$$pV^{\gamma} = 常数 \qquad (1)$$

及 $p^{\gamma-1}/p^{\gamma} =$ 常数，这三个式子均是准静态绝热过程方程，而式(1)也称为泊松公式。

理想气体准静态绝热过程中作的功可从 pdV 积分求出，也可从温度变化或 p、V 变化

求出

$$W = U_2 - U_1 = \nu C_{V,m}(T_2 - T_1)$$
$$= \frac{\nu R}{\gamma - 1}(T_2 - T_1)$$
$$= \frac{1}{\gamma - 1}(p_2 V_2 - p_1 V_1)$$

多方过程 polytropic process 理想气体的状态参量满足

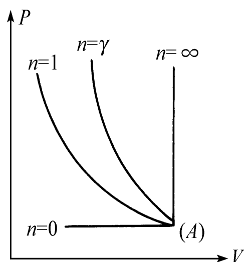
$$pV^n = 常数 \quad (1)$$

的准静态过程。其中 p、V 为气体的压强与体积，n 为一常数，称为多方指数，n 可取任何实数。

气体所进行的实际过程往往既非绝热也非等温，但等压、等温、等体过程均可写成与绝热过程类似的形式。

$$pV^n = C \quad (2)$$

其中等压时 $n=0$，等温时 $n=1$，绝热过程 $n=\gamma$ 而等体时 $n\to\infty$（说明，对于等体过程，只要对式(2)两边各取“无穷大”次根，则 $p^{\frac{1}{n}}V = C'$。当 $n\to\infty$ 时就是 $V = C''$ 的等体过程）。上述四个过程在 p-V 图上表示如下所示：



若把式(2)中的 n 推广为可取任一实数，则这样的过程称为多方过程，而式(2)也称为多方过程方程。与绝热过程类似，多方过程也可表示为

$$TV^{n-1} = C_1, \quad \frac{p^{n-1}}{T^n} = C_2$$

多方过程中的功的表达式：只要在准静态绝热过程的功（见“绝热过程”）中分别以 n 代替其中的 γ，就是多方过程中的功的表达式。至于多方过程中的热容，可见“理想气体热容”。

多方热容 heat capacity in polytropic process 见“理想气体热容”。

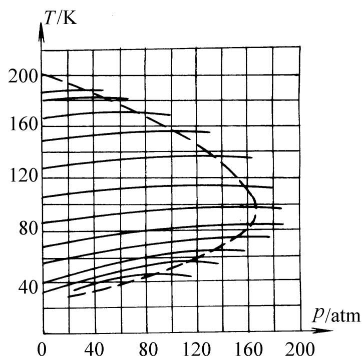
焦耳-汤姆孙效应 Joule-Thomson effect 气体通过多孔塞时所发生的温度变化现象，也可泛指较高压强气体经过多孔塞、毛细管、节流阀（通径很小的阀门）等装置降为低压气体时发生的温度变化现象。

这是由焦耳和汤姆孙（即开尔文(Kelvin)）最早于1852年在研究气体内能的性质时所发现的，人们称它为焦耳-汤姆孙效应，也称为节流效应、焦-汤效应。焦耳-汤姆孙效应是一种等焓的绝热不可逆过程。它表示气体在初态时的焓 $H_1 = U_1 + p_1V_1$ 等于在终态时的焓 $H_2 = U_2 + p_2V_2$（U_1、p_1、V_1 及 U_2、p_2、V_2 分别为气体在初态及终态时的内能、压强及体积），但在中间经历的状态均不是平衡态，对于这些中间状态，不能用 $H = U + pV$ 来表示。理想气体在节流前后的温度不变，实际气体的温度可升高也可降低，其升温降温的范围随气体种类不同而有很大差异，其温度改变情况通常利用由实验测出的在 T-p 图中的等焓线求出。图中一条条接近水平的曲线表示了某种气体的等焓线。每一条等焓线上的焓值均相同。节流过程中只要能定出初态时的温度、压强及终态时的压强，即可由所对应的等焓线确定终态的温度。应注意，节流过程虽是等焓过程，但其状态变化并不沿等焓线变化，因为节流的任一中间状态均不是平衡态，均不能在状态图上以一个点表示其状态。T-p 图中等焓线的斜率称为焦耳-汤姆孙系数（也称节流系数、焦-汤系数），以 μ 表示：

$$\mu = \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H$$
$$= \frac{1}{C_p}\left[T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - V\right]$$

图中任一条等焓线的最高点处的 $\mu=0$，把这些点联结起来的曲线称为转换曲线，在图中以虚线表示。在转换曲线以内的区域 $\mu>0$，称为节流致冷区；转换曲线以外区域 $\mu<0$，称为节流致热区。转换曲线中温度最高的那一点的温度称为转换温度。

节流膨胀致冷是在致冷流程中广为使用的一种降温手段，与（可逆）绝热膨胀致冷比较，



降温效果前者不如后者。但由于节流膨胀设备十分简单,无运动系统,操作简单(甚至不需操作),特别当降温到足够低温度其气体被液化时,不会在气缸中发生所谓"水击"现象(绝热膨胀降温要使用气缸,若已被液化的液体不能及时排出气缸会使膨胀机起水压机作用,从而损坏机械),因而通常只使用节流降温而不使用绝热膨胀降温。

焦耳-汤姆孙系数 Joule-Thomson coefficient 见"焦耳-汤姆孙效应"。

节流膨胀效应 throttle expansion effect 即"焦耳-汤姆孙效应"。

转换曲线 inversion curve 在 $T-p$ 图上诸等焓线中满足焦耳-汤姆孙系数 $\mu=\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_H$ 为零的点所联结成的曲线,见"焦耳-汤姆孙效应"。

转换温度 inversion temperature 转换曲线上的最高温度。

微分节流效应 differential throttle effect 也称微分焦耳-汤姆孙效应,指气体压强降低 $\mathrm{d}p$ 时产生的温度改变 $\mathrm{d}T$。从焦耳-汤姆孙效应可知

$$\begin{aligned}\mathrm{d}T &= \mu\mathrm{d}p \\ &= \frac{1}{C_p}\left[T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p - V\right]\mathrm{d}p\end{aligned}$$

循环过程 cycle process 系统从初态出发,经过一系列中间状态最后回到原来状态的过程。对于体积可变系统,循环过程可在 $p-V$ 图上以一闭合曲线表示。若其循环曲线方向为顺时针,该循环起热机作用;逆时针起致冷机或热泵作用。

热机 heat engine 用于工作物质吸热对外作循环功的机械装置。

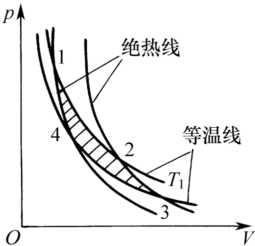
(一)热机的种类很多,若以其循环形式的不同,可有多种多样的热机循环,如卡诺循环、奥托循环、狄塞尔循环、斯特林循环等。若按工质接受燃料所释放能量的方式的不同来区分,则可分为内燃机和外燃机。内燃机中,燃料在热机内部燃烧,所生成的气体就是热机的工质,如汽油机、柴油机;外燃机中,燃料在热机外部燃烧,能量通过热交换器传给工质,如蒸汽机。若按机器运动部件的运动形式不同,又可分为往复式与旋转式两种。属于往复式内燃机的,如汽油机、柴油机、煤气机等;属于旋转式内燃机的,如燃汽轮机、转子发动机。属于往复式外燃机的,如蒸汽机、斯特林发动机;属于旋转式外燃机的,如汽轮机。

(二)热力学中的理想循环过程　在实际的热机中各种因素交织在一起十分复杂,要研究它需采用理想化方法,以便突出主要矛盾与主要特征。常以简化了的理想循环过程来表示热机的热力学过程。在简化过程中常作如下假设:(1)若工作物质是气体,则假设它是理想气体;(2)认为循环中每一个过程都是可逆过程,不考虑气体流动时的黏性、运动部件之间的摩擦、热传递等所造成的损失等;(3)以多方过程近似代替循环中的每一个过程。热机至少应包括如下三个组成部分:(1)循环工作物质;(2)两个以上的温度不相同的热源,使工作物质从高温热源吸热,向低温热源放热;(3)对外作功的机械装置。

(三)热机效率　既然在 $p-V$ 图上可以一简化了的闭合曲线来表示循环过程,则其顺时针循环称为热机循环。在热机循环中一般总在较高温度吸热,在较低温度放热,且在一个循环中系统从外界吸的总热量 $|Q_1|$ 必大于向外界释放的总热量 $|Q_2|$,$|Q_1|-|Q_2|=|W|$,W 为在一个循环中热机向外界作的功,它应等于在 $p-V$ 图中循环曲线所围的面积。热机效率定义为

$$\eta_{热}=\frac{|W|}{|Q_1|}=\frac{|Q_1|-|Q_2|}{|Q_1|}$$

卡诺[循环]热机 Carnot cycle heat engine 由两个准静态等温过程及两个准静态绝热过程所组成的热机。1824年卡诺(S.Carnot)在对蒸汽机所作的热力学研究时所采用的方法与众不同,他对蒸汽机所作的简化、抽象的程度要比普通的热力学循环过程还要彻底。他设想在整个循环过程中仅与温度为 T_1、T_2 的两个热源接触,整个循环由两个可逆等温过程及两个可逆绝热过程组成,如图所示。



其中1—2、3—4是温度分别为 T_1 及 T_2 的等温膨胀和等温压缩过程,2—3及4—1分别是绝热膨胀和绝热压缩过程。这样的热机称为卡诺热机。卡诺热机的工作物质不一定是理想气体,可以是其他任何物质。在循环中工作物质从 T_1 热源吸热 Q_1,向 T_2 热源放热 $|Q_2|$,向外输出功 W。显然,在1—2等温膨胀过程中吸热 $Q_1=\nu RT_1\ln(V_2/V_1)$,在3—4等温压缩过程中放热 $Q_2=\nu RT_2\ln(V_4/V_3)$,而2—3、4—1均为绝热膨胀过程。设气体的比热容比为 γ,则 $T_1V_2^{\gamma-1}=T_2V_3^{\gamma-1}$,$T_2V_4^{\gamma-1}=T_1V_1^{\gamma-1}$。由此可得 $V_2/V_1=V_3/V_4$。再由热机效率定义可知卡诺热机效率

$$\eta_{卡热}=\frac{|Q_1|-|Q_2|}{|Q_1|}=\frac{T_1-T_2}{T_1}$$

$$=1-\frac{T_2}{T_1}$$

可见可逆卡诺热机效率公式十分简单,它与膨胀前后的气体体积大小无关,而仅与 T_1、T_2 有关。根据卡诺定理,一切工作于相同高低温热源之间的热机,以可逆卡诺热机效率最高。由于低温热源通常为室温或江、河、地下水等。故由上式可知提高热机效率的最有效方法是尽量增高高温热源温度。

内燃机 internal combustion engine 燃料在热机内部(例如气缸内或透平内)燃烧,所生成的气体就是热机的工质的热机。例如汽油机、柴油机、转子发动机、燃汽轮机等。内燃机有往复式和旋转式两种。前者靠工质在汽缸内膨胀推动活塞往复运动实现对外作功,如汽油机及柴油机等;而旋转式靠工质推动叶轮或转子回转运动实现对外作功,如转子发动机、燃汽轮机等。

外燃机 outer combustion engine 燃料在热机外部燃烧,能量通过热交换器传给工质(如蒸汽)的热机,如蒸汽机、汽轮机等。它也有往复式及旋转式两种,前者如蒸汽机等,后者如汽轮机等。

奥托循环 Otto cycle 燃料气体在气缸内点火燃烧作功的热机循环,也称定体加热循环。工程师奥托(A.Otto)于1876年最先设计了使用气体燃料的火花点火式四冲程内燃机,使用的工作物质主要是汽油及天然气等。对这类内燃机循环过程进行简化即奥托循环,如图1所示,其机器运行示意如图2所示。

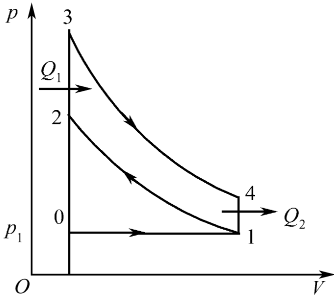


图1 奥托循环

(1)(0→1)吸气 如图2之(a)所示,由于旋转飞轮的惯性,活塞从上死点向下运动时,进气阀同时打开,从气化器(又称化油器,是汽油机中用以使燃料与空气混合成合适的可燃混合物的部件)吸入1atm室温下的空气及燃料气

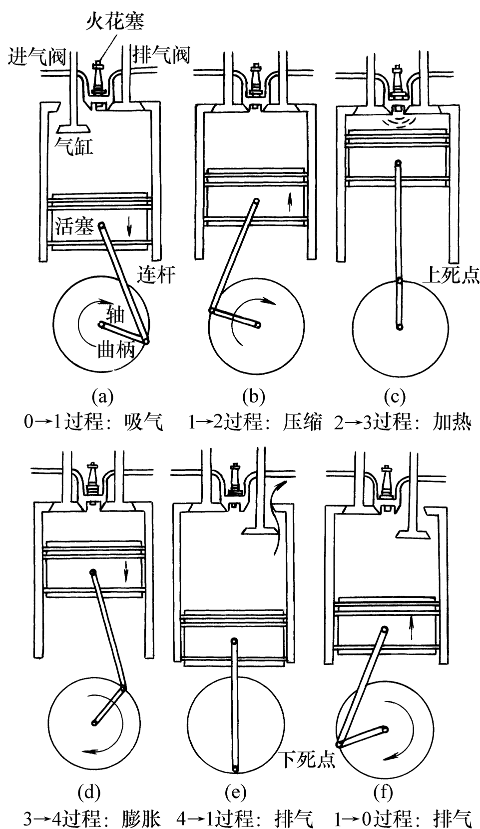


图2　汽油机工作过程图(选自《大百科全书·物理卷》)

体(如汽油蒸气等)的混合气体,直到活塞移动到下死点为止(说明:活塞向上运动时,由于飞轮的惯性,只有移到上死点后才可反向运动;同样向下运动的活塞只有移到下死点后才可向上运动,在上死点及下死点处,活塞与连杆、曲柄组成的系统成一直线,如图(2)(c)及(e)所示)。

(2)(1→2)绝热压缩　如图(b)所示,活塞到达下死点后向上运动,压缩混合气体(因活塞运动速度很快,可认为这是一个绝热过程),直到活塞移动到即将到达上死点的时刻。此时气体温度上升到可燃点以上。

(3)(2→3)定体加热　如图(c)所示,此刻火花塞 C 放出电火花,点燃气体,因为活塞在死点附近运动速度很小,而燃烧过程十分迅速,可认为燃烧是在定体下发生。温度、压强同时增加。整个过程中气体吸入 Q_1 的燃烧热。

(4)(3→4)绝热膨胀　如图(d)所示,燃烧生成的气体推动已经过上死点的活塞向下运动,对外作功。与(1→2)类似,可认为这是一个绝热过程,温度和压强同时降低直到活塞运动到下死点为止。

(5)(4→1)定体放热　如图(e)所示,排气阀打开,部分气体逸出,气体在定体下降低压强同时放出热量。

(6)(1→0)排气　如图(f)所示,由于飞轮惯性,活塞向上运动,将残余气体排出。整个循环仅在2→3过程等体吸热 Q_1,4→1过程等体

放热 Q_2，设气体定体摩尔热容为 $C_{V,m}$，则 $Q_1=\nu C_{V,m}(T_3-T_2)$，$Q_1=\nu C_{V,m}(T_1-T_4)$，由热机效率式知

$$\eta_{热}=1-\frac{|Q_2|}{|Q_1|}=1-\frac{T_4-T_1}{T_3-T_2}$$

因为(1→2)和(3→4)是绝热过程，再利用准静态绝热过程方程可得

$$\eta_{热}=1-\frac{1}{K^{\gamma-1}}$$

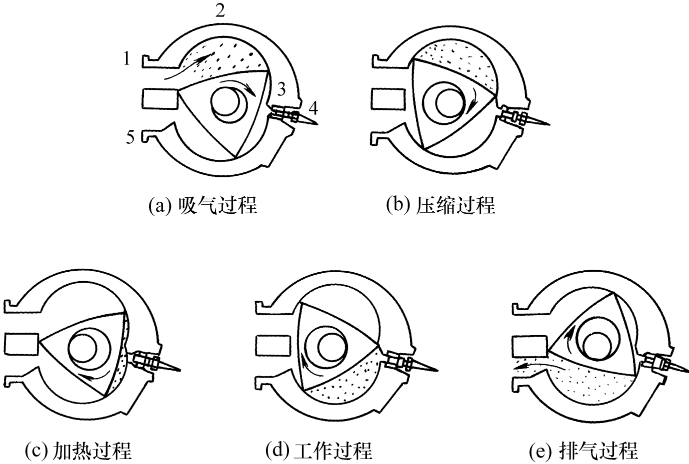
其中 $K=V_1/V_2$ 称在绝热容积压缩比，γ 为比热容比。可见 K 越大，效率越高。但 K 过大时，将使气体处于"2"点的状态时有过高的压强，而"2"点正好位于下死点，这时曲柄与活塞成一直线，气缸内气体燃烧所产生的高压强非但不能产生推动活塞运动的动力，相反会给曲轴两端联接键及飞轮、曲轴等产生很大的冲击力。现代汽油机的压缩比限制在 4～10 之间。其实际效率不超过 40%。

汽油机 gasoline engine 采用奥托循环，以汽油为燃料的热机，见"奥托循环"。

定容加热循环 isochoric heating cycle 即"奥托循环"，也称"定体加热循环"。

定体加热循环 isochoric heating cycle 即"奥托循环"。

转子发动机 rotor motor 以转子的旋转运动代替活塞往复运动的，以汽油为燃料的内燃机，其结构及工作原理如下图所示。工作原理与汽油机相同。由于去掉了曲柄、连杆机构，大大减轻机械的重量。



(a) 吸气过程　(b) 压缩过程

(c) 加热过程　(d) 工作过程　(e) 排气过程

转子发动机工作原理图(该图选自《大百科全书·物理卷》)

1. 进气口；2. 缸体；3. 转子；4. 火花塞；5. 排气口

狄塞尔循环 Diesel cycle 使挥发性较低的液体燃料直接进入气缸内，然后气化、燃烧作功(不需点火)的内燃机循环，也称为定压加热循环。它起源于工程师狄塞尔(R. Diesel)于 1892 年提出的压缩点火式内燃机的原始设计。所谓压缩点火式就是使燃料气体在气缸中被压缩到它的温度超过它自己的点火温度(例如，气缸中气体温度可升高到 500℃以上，而柴油燃点为 335℃)，这时燃料气体在气缸中一面燃烧，一面推动活塞对外作功。1897 年最早制成了以煤油为燃料的内燃机，以后改用柴油为燃料，此即通常所称的柴油机。其简化循环称为狄塞尔循环，也称为定压加热循环。其循环过程如图 1 所示，其机器的运行示意如图 2 所

示。简述如下：

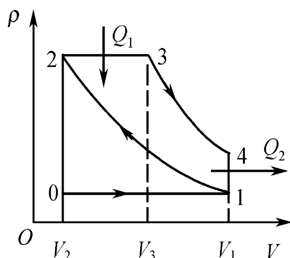


图 1　狄塞尔循环

(1)(0→1)吸气：如图 2(a)所示活塞从图 2 中上死点(即图 1 之 V_1 点)移动到下死点(即图 1 之 V_2 点)的过程中，进气阀打开，吸入外部的空气。

(2)(1→2)空气绝热压缩：如图(2)(b)所示，因活塞移动较快，近似认为是绝热过程。

(3)(2→3)等压燃烧：如图 2(c)所示。(1—2)绝热压缩终了时，空气温度已超过燃料的燃点，这时利用高压油泵徐徐将燃油(如柴油)通过喷油嘴喷入气缸中，燃油与高温空气混合后燃烧，这时的活塞已过了上死点 V_1，即将(或已

排气阀　进气阀　气缸　活塞　连杆　轴　曲柄　上死点

(a) 0→1过程：进气　(b) 1→2过程：压缩　(c) 2→3过程：燃烧

下死点

(d) 3→4过程：工作　(e) 4→1过程：排气　(f) 1→0过程：排气

图 2　柴油机工作过程原理图(该图选自《大百科全书·物理卷》)

经)向下运动。气体在气缸内一面燃烧,温度升高,一面推动活塞对外作等压功。

(4)(3→4)绝热膨胀:如图 2(d)所示,当燃料燃烧完后,气体温度不可能再升高,气缸中的气体继续推动活塞绝热膨胀,直到它移动到下死点位置。在膨胀过程中压强、温度均降低。

(5)(4→1)排气阀打开,定体放热,如图 2(e)所示。

(6)(1→0)排气,将气缸内的余气全部排出,如图(f)所示。

在整个循环中仅在(2→3)过程等压吸热 $Q_1 = \nu C_{p,m}(T_3 - T_2)$,(4→1)过程中等体放热 $Q_2 = \nu C_{V,m}(T_1 - T_4)$ 利用绝热过程方程,并令 γ 表示比热容比;$\rho = V_3/V_2$ 称为定压容积压缩比,$K = V_1/V_2$ 称为绝热容积压缩比,则热机效率

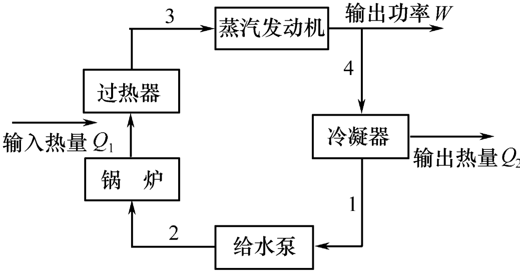
$$\eta_{热} = 1 - \frac{|Q_2|}{|Q_1|} = 1 - \frac{1}{K^{\gamma-1}} \cdot \frac{\rho^{\gamma} - 1}{\gamma(\rho - 1)}$$

由该式可知容积压缩比 K 越大,效率也越高,这与奥托循环是类似的。由于 ρ 比 1 大得多,比热容比 $\gamma > 1$,故在 K 相同下,狄塞尔循环效率比奥托循环低。但由于狄塞尔循环是在过了下死点位置后喷油燃烧的,不会出现奥托循环中可能发生的早燃及爆震现象,就没有压缩比小于 10 的限制条件,K 可达 15～20 之间,所以柴油机的实际效率高于汽油机。柴油机比汽油机笨重但功率较大,因而常用作大型卡车、工程机械、机车、船舰等的动力装置。

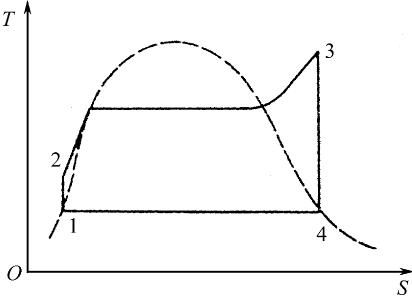
定压加热循环 isobaric heating cycle 即“狄塞尔循环”。

柴油机 diesel oil engine 采用狄塞尔循环的内燃机,见“狄塞尔循环”。

兰金循环 Rankine cycle 利用水蒸气作为工作物质,锅炉为高温热源的热机,其流程图及 $T-S$ 图分别示于下图之(a)图及(b)图。(b)图中虚线以下区域即水的气-液共存区,该区域之左为液态区,之右为气态区,其工作流程如下:状态 1 的水借助给水泵的提升进入锅



(a)



(b)

兰金循环

炉而变为状态 2，然后经锅炉加热成蒸汽后进入过热器中继续加热到状态 3，使其温度进一步升高(其作用主要有二：一是继续升高温度从而进一步增加效率；二是从饱和蒸汽(称为湿蒸汽)变为非饱和蒸汽(称为干蒸汽)，在 2→3 过程中吸入的总热量为 Q_1。然后，使干蒸汽在发动机(蒸汽机或汽轮机)内绝热膨胀对外作功 W，膨胀降温后的蒸汽再进入冷凝器凝结为水，放出热量 Q_2。冷凝水再通过给水泵送入锅炉，完成一个循环。该循环在 $T-S$ 图上表示如(b)图所示。

蒸汽机　steam engine　采用"兰金循环"，使蒸汽在汽缸内作往复运动，并由曲轴将活塞的往复运动转换为旋转运动的作功机械。它结构简单，工作可靠，可超负荷工作，但效率仅 10%～14%左右。

汽轮机　steam turbine　也称蒸汽透平发动机，是一种旋转式蒸汽动力装置，高温高压蒸汽穿过固定喷嘴成为加速的气流后喷射到叶片上，使装有叶片排的转子旋转，同时对外作功。汽轮机是现代火力发电厂的主要设备，也用于冶金工业、化学工业、舰船动力装置中。

制冷机　refrigerator　依靠外界对系统作功，使热量不断地从低温热源流向高温热源的机械。

与热机循环类似，其状态变化过程在 $p-V$ 图上可表示为一闭合曲线，但其循环曲线的方向为逆时针。在一个循环中它从较低温热源吸热(设总吸热 Q_2)，向较高温热源放热(设总放热 Q_1)，同时外界对系统作功 W。显然 $W=|Q_1|-|Q_2|$。

制冷机的"效率"称为制冷系数 $\eta_{冷}$，$\eta_{冷}$定义为

$$\eta_{冷}=\frac{Q_2}{W}=\frac{|Q_2|}{|Q_1|-|Q_2|}$$

因为 $\eta_{冷}$的数值可以大于 1，故 $\eta_{冷}$不称为制冷机效率而称为制冷系数。

可逆卡诺制冷机是可逆卡诺热机的逆循环，它从低温热源 T_2 等温吸热 Q_2，向高温热源等温放热 Q_1，外界作功 W，则其制冷系数 $\eta_{卡诺}=\frac{T_2}{T_1-T_2}$。根据卡诺定理，可逆卡诺制冷机是工作于相同高低温热源间制冷机中工作效率最高的，因通常 T_1 即室温，可见制冷温度越低，其制冷系数越小。若 T_2 为绝对零度，则制冷系数为零。

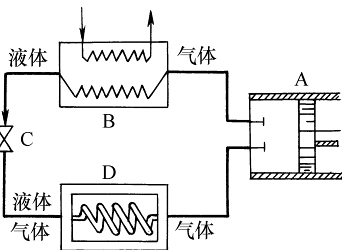
卡诺制冷机　Carnot refrigerator　由两个等温过程与两个绝热过程组成的制冷机循环，对于可逆过程，即可逆卡诺制冷机，见"制冷机"。

气体压缩式制冷机　refrigerator with compressed gas　使气体制冷工质先后经压缩、冷却、膨胀最后制得低温液体或气体的制冷机，它主要有蒸气压缩式制冷机与深度冷冻制冷机两种形式。

(一)蒸气压缩式制冷机

制冷工质(气体)被压缩、冷却到室温后已变成压缩液体(所以在室温、大气压下的气体是蒸气而不是气体)，然后经过节流膨胀而制得低温液体的制冷机称为蒸气压缩式制冷机。家用电器中的冰箱、空调以及冷库用的冷冻机等基本上都属于这类制冷机，其循环过程示于图中。简述如下：

①气态制冷工质被压缩机 A 压缩后成为温度较高、压强较大的蒸气；②压缩蒸气进入冷凝器 B 中冷却(通常冷却方法有两种：一种是水冷，另一种是空气冷却)。蒸气温度降到室温后释放出汽化热而逐渐变为液体，直至全部被液化。在整个冷却过程中共释放 Q_1 的热量；③压强较高、室温下的液体进入节流阀 C 进行焦耳-汤姆孙膨胀使温度降低，在节流后的产物中已有部分液体变为同温度下的蒸气；④低温液体和相同温度的蒸气一起进入蒸发器 D 中。经过吸热，液体全部蒸发为蒸气，然后温度逐渐升高到室温，最后蒸气全部进入压缩机 A 并开始第二次循环。



蒸气压缩式制冷机的制冷工质主要是氨与氟里昂。氨的制冷温度比较低,它主要被用于冷库。以往的冰箱与空调及冷饮机都用各种型号的氟里昂作为制冷工质。由于氟里昂逸出进入大气后将进入平流层并长期停留,它在平流层中会发生光化学反应分解出氯原子,而1个氯原子能连续破坏1万个臭氧分子,对大气产生严重污染(大气中的臭氧层是阻挡太阳光线中的紫外光的有效生物保护屏,现今在南极高空大气已发现有臭氧层的空洞),故氟里昂的使用将被严格禁止,(按国际协议我国将在2005年彻底禁用氟里昂),一系列新的代用品已逐步在推广使用中。

(二)深度冷冻制冷机

若工作气体被压缩冷却到室温后经节流尚不能使气体液化,其液化温度还远低于此节流后温度,这时必须改用另一种称为深度冷冻的循环。在深度冷冻制冷机中,高压气体经热交换器冷却到足够低温度后分为两路:一路经膨胀机绝热膨胀降温(其降温效果明显高于节流降温),然后将膨胀后的低压气体去冷却另一路高压气体;另一路被冷却后的高压气体进入最后一级热交换器进一步冷却后,节流膨胀产生部分液体,而未被液化的低温蒸汽经过逐级热交换器升温吸热到接近室温后再进入压缩机作第二次循环。属于这类制冷机的主要有液氮机(0.101 MPa时的液氮温度为77 K)、液氦机(0.101 MPa时的液氦温度为4.2 K)及制氧机(工业上制得氧气是先将空气液化、然后在气液共存情况下,利用氧的沸点(90 K)较高,易于冷凝;氮的沸点(77 K)较低易于蒸发的特点,利用分馏等方法将氧、氮分离的)。

蒸气压缩式制冷机 refrigerator with compressed vapour 见“气体压缩式制冷机”。

深度冷冻制冷机 refrigerator in deep freezing 见“气体压缩式制冷机”。

热泵 heat pump 将制冷机用来对物体加热的机械。制冷机不仅可用来降低温度,也可用来升高温度。例如,冬天取暖,常采用电加热器,它把电功直接转变为热后被人们所利用,这是很不经济的。若把这电功输给一台制冷机,使它从温度较低的室外或江、河的水中吸取热量向需取暖的装置输热,这样除电功转换为热外,还额外从低温热源吸取了一部分热传到高温热源去,取暖效率当然要高得多,这种装置称为热泵,故热源实际上就是一台制冷机。目前被广为使用的冷、暖两用空调器实际上就是一台冷冻机。它将两只热交换器分别装于室内与室外,并借助一只四通阀对流出压缩机的高压气体的流向进行切换。在冬天,温度较高的较高压气体流进室内热交换器被室内空气冷却,从而升高室内温度(这时室内热交换器起冷凝器作用)。被冷却而呈液态的高压流体经毛细管节流降温而进入室外热交换器蒸发吸热,最后流进压缩机。在夏天从压缩机流出的较高温较高压气体进入室外热交换器放热冷却而成液态,再经毛细管节流降温而进入室内热交换器蒸发吸热,最后回流入压缩机。室内与室外热交换器均配有一台风机使之作强迫对流传热。

热力学第二定律 second law of thermodynamics 指明一切涉及热的现象的实际宏观过程方向的热力学定律。它揭示了一切与热相联系的自发过程都是不可逆的。

(一)问题的提出:历史上,热力学第二定律的发现是从如何提高热机效率及能否把热机效率提高到100%这一问题的研究开始的。青年工程师卡诺(S.Carnot)于1824年提出了卡诺循环,并发现了卡诺定理,因而解决了上述两个问题。从卡诺定理知,其效率达到100%的热机,即只吸热而不放热,并把全部吸的热转化为有用功的热机——第二类永动机是不可能存在的。卡诺定理不仅证明第二永动机不可能存在,还揭示了功能够自发地转化为热,但热转化为功是有条件的这一不可逆性。

(二)第二定律的表述:由于与热相联系的自发过程可有很多种,因而第二定律的表述也有很多种,其中被广为使用的是开尔文表述与克劳修斯表述的。开尔文(Kelvin)是于1851年从功转化为热这一不可逆现象出发作出热力学第二定律的表述的。开尔文表述是:不可能从单一热源吸收热量使之完全转变为功,而不产生其他影响。表述中的“单一热源”指温度均匀且恒定不变的热源。“其他影响”指除“由

单一热源吸热全部转化为功”以外的任何其他变化。而克劳修斯(R. Clausius)是从“热量可自发地从高温物体传到低温物体,反之则不能自发发生”这一不可逆性出发作出热力学第二定律的表述的。克劳修斯表述是:不可能把热量从低温物体转移到高温物体而不引起其他影响。利用反证法可证明开尔文表述与克劳修斯表述等价。实际上还可有其他各种表述,例如普朗克表述等,它们都与开尔文表述及克劳修斯表述等价。

(三)第二定律的实质、第一定律与第二定律的区别与联系、“可用能量”虽然自然界中的不可逆过程多种多样,可能在一个过程中同时兼有力学、热学、化学及耗散过程不可逆性中的某几种或全部,但它们都有如下特点:在一切与热相联系的自然现象中它们自发地实现的过程都是不可逆的。这就是热力学第二定律的实质。因为一切实际过程必然与热相联系,故自然界中所有的实际过程都是不可逆的。第一定律主要从数量上说明功和热量的等价性,但第二定律却从转换能量的质的方面说明热量和功的本质区别,从而揭示自然界中普遍存在的一类不可逆过程。人类所关心的是可用来作有用功的能量。但是吸收的热量不可能全部用来作功,任何不可逆过程的出现,总伴随有“可用能量”被浪费的现象发生。例如两个温度不同的物体间的传热过程,其最终结果无非使它们的温度相同。若我们不是使两物体直接接触,而是借助一部可逆卡诺热机,把温度较高及温度较低的物体分别作为高温及低温热源,在卡诺机运行过程中,两物体温度渐渐接近,最后达到热平衡,在这过程中可输出一部分有用功。但是若使这两物体直接接触而达热平衡,则上述那部分可用于作功的能量却白白地被浪费了。

克劳修斯(热力学第二定律)表述　Clausius's statement of second law of Thermodynamics　见“热力学第二定律”。

开尔文(热力学第二定律)表述　Kelvin's statement of second law of Thermodynamics　见“热力学第二定律”。

第二类永动机　perpetual motion of the second kind　从单一热源吸热使之全部转化为有用功的理想热机,是一种不消耗任何能源的热机。虽然它不违背热力学第一定律,却违背热力学第二定律的开尔文表述。因而也可把“第二类永动机不可能实现”视为热力学第二定律的另一种表述。热力学第一、第二定律的确立,从科学上对永动机作了最后否决,使人们走出幻想境界,并不断地去最有效地利用自然界所能提供的各种能源。

可用能[量]　usable energy　见“热力学第二定律”。

卡诺定理　Carnot Theorem　是卡诺(S. Carnot)于1824年在卡诺循环基础上提出的一条定理,其表述为:(1)在相同的高温热源和相同的低温热源间工作的一切可逆热机其效率都相等,而与工作物质无关。(2)在相同高温热源与相同低温热源间工作的一切不可逆热机,其效率都不可能大于可逆热机的效率。卡诺定理不仅为我们指明了提高热机效率的途径,更重要的是从它出发可揭示热力学第二定律这一普适规律。但卡诺由于历史的局限性而信奉热质说(卡诺是在热质说的错误观点指导下,把热机类比为水轮机,利用永动机不可能存在这一科学信念为前提导出卡诺定理的),因而无法看清卡诺定理实际上已触及热力学第二定律的底蕴。20多年后克劳修斯审查了卡诺的工作,于1850年提出了热力学第二定律的克劳修斯表述,1854年他又以卡诺定理为依据导出了克劳修斯等式与不等式,并在此基础上引入了“熵”这一态函数。

克劳修斯等式　Clausius equality　在任一个可逆闭合循环内 $\bar{d}Q/T$ 的积分为零,其中 T 为热力学温度,$\bar{d}Q$ 为在该循环任一微小变化过程中吸的热。这是1854年克劳修斯(R. Clausius)在研究卡诺热机时利用卡诺定理建立的。利用克劳修斯等式可建立态函数熵。

克劳修斯不等式　Clausius inequality　在任一不可逆闭合循环中 $\bar{d}Q/T$ 的积分恒小于零。它可利用卡诺定理予以证明。在引入熵后,可利用克劳修斯不等式导出熵增加原理。

熵　entropy　热力学系统用于表示热力学第二定律的态函数。在热力学中,熵 S 是如此定

义的：在某一微小可逆变化过程中的熵变 $dS=(\bar{d}Q)_{可逆}/T$，其中 $(\bar{d}Q)_{可逆}$ 为在可逆微过程中吸的热，T 为热力学温度，但对于不可逆过程该式不成立。熵的英文词 entropy 是从希腊文中借用来的，其词意是“转变”。熵的中文词意是热量被温度除的商。由于 $T>0$，故系统可逆吸热时熵增加，可逆放热时熵减少。因 Q 是广延量，T 是强度量，故熵也是广延量。熵的单位是 $J\cdot K^{-1}$。

关于熵还应注意如下几点：(1)对于可逆过程，熵可通过 $\bar{d}Q/T$ 的积分求得；对于不可逆过程，可设想某一连接相同初、末态的可逆过程，由该过程熵变的计算去求不可逆过程的熵变。(2)熵是态函数，系统状态参量确定，其熵也确定。对于质量不变的 $p-V$ 系，则熵可看做 T、V 的函数 $S(T,V)$ 或 T、p 的函数 $S(T,p)$。(3)若把某一初态看做参考态，则任一状态的熵可表示为 $S=\int\bar{d}Q/T+S_0$(限于可逆过程)，其中积分应是从参考态开始的路径积分。S_0 是参考态的熵，是一任意常数。

以上是从热力学(即宏观)的角度去理解熵，故也称为热力学熵、克劳修斯熵。从微观(即统计物理)角度去理解，熵是系统内微观粒子的热运动杂乱程度的度量，可以玻尔兹曼关系 $S=k\ln\Omega$ 去定义熵，其中 k 是玻尔兹曼常量，Ω 为系统的热力学概率(参见“玻尔兹曼熵”)。这样定义的熵也称为统计物理熵、玻尔兹曼熵。

熵的概念较抽象，很难一下子就认识得十分透彻。但它又十分重要，其重要性不亚于能量，甚至超过能量。20 世纪上半叶，把熵的概念应用于信息论就有信息熵，应用于生命系统就有生物熵(也称为生物中的负熵)，如今也有人把熵的概念推广到人文科学中。

热力学熵 thermodynamic entropy　热力学对熵的定义，见“熵”。

克劳修斯熵 Clausius entropy　即热力学对熵的定义，这是克劳修斯最早提出来的，见“熵”。

理想气体的熵 entropy of ideal gas　对于可逆过程 $dS=(dU+p\,dV)/T$，由此可求得 ν mol理想气体在 $(T、V)$ 状态及 (T,p) 状态的熵分别为

$$S(T,V)=\nu C_{V,m}\ln\frac{T}{T_0}+\nu R\ln\frac{V}{V_0}+S_0 \quad (1)$$

$$S(T,p)=\nu C_{p,m}\ln\frac{T}{T_0}-\nu R\ln\frac{p}{p_0}+S'_0 \quad (2)$$

式中 $C_{V,m}$ 及 $C_{p,m}$ 分别为定体及定压摩尔热容，S_0 及 S'_0 为不同的熵常数。只要初、末态确定，就可利用(1)、(2)式计算理想气体的熵。

温-熵图 temperature—entropy diagram　以温度及熵两者同时作为独立变量来表示系统状态变化的图线，一般在温熵图中温度用作纵坐标，熵用作横坐标，温-熵图曲线下的面积表示过程中吸(或放)的热量。温-熵图在工程中有很重要的应用，通常由实验对于一些常用的工作物质作各种温-熵图以便于应用。

熵增加原理 principle of entropy increase　利用绝热过程中的熵是不变还是增加来判断过程是可逆还是不可逆的基本原理。利用克劳修斯等式与不等式及熵的定义可知，在任一微小变化过程中恒有 $\bar{d}Q/T\leqslant dS$，其中不等号适于不可逆过程，等号适于可逆过程。对于绝热系统，则上式又可表为 $dS\geqslant0$。这表示绝热系统的熵绝不减少。可逆绝热过程熵不变，不可逆绝热过程熵增加，这称为熵增加原理。利用熵增加原理可对热力学第二定律理解得更深刻：

(1)不可逆过程中的时间之矢。根据熵增加原理可知：不可逆绝热过程总是向熵增加的方向变化，可逆绝热过程总是沿等熵线变化。一个热孤立系中的熵永不减少，在孤立系内部自发进行的涉及与热相联系的过程必然向熵增加的方向变化。另外，对于一个绝热的不可逆过程，其按相反次序重复的过程不可能发生，因为这种情况下的熵将变小。“不能按相反次序重复”这一点正说明了：不可逆过程相对于时间坐标轴肯定不对称。但是经典力学相对于时间的两个方向是完全对称的。若以 $-t$ 代替 t，力学方程式不变。也就是说，如果这些方程式允许某一种运动，则也同样允许正好完全相反的运动。这说明力学过程是可逆的。所以“可逆不可逆”的问题实际上就是相对于时

间坐标轴的对称不对称的问题。

(2)能量退降。由于任何不可逆过程发生必伴随“可用能”的浪费(见“可用能”)。对于绝热不可逆过程，熵的增加 ΔS 必伴随有 $W_{贬}$ 的能量被贬值，或称能量退降了 $W_{贬}$。(说明：对于非绝热系统，则系统与媒质合在一起仍是绝热的，因而能量退降概念同样适用。)可以证明，对于与温度为 T_0 的热源接触的系统，$W_{贬}=T_0\Delta S$。由此可见，熵可以作为能量不可用程度的度量。换言之，一切实际过程中能量的总值虽然不变，但其可资利用的程度总随不可逆导致的熵的增加而降低，使能量“退化”。被“退化”了的能量的多少与不可逆过程引起的熵的增加成正比。这就是熵的宏观意义，也是认识第二定律的意义所在。我们在科学和生产实践中应尽量避免不可逆过程的发生，以减少“可用能”被浪费，提高效率。

(3)最大功原理、最小功。既然只有可逆过程才能使能量丝毫未被退化，效率最高，所以在高低温热源温度及所吸热量给定情况下，只有可逆热机对外作的功最大，这称为最大功原理。与此类似，在相同高低温热源及吸放热量相等的情况下，外界对可逆制冷机作的功最小，这样的功称为“最小功”。求“最大功”及“最小功”的关键是：系统(工作媒质)与外界合在一起的总熵变应为零。

卡拉西奥多里(热力学第二定律)表述 Caratheodory statement of second law of thermodynamic 一个系统的任一给定平衡态附近，总有这样的态存在：从给定态出发，不可能经过绝热过程抵达(说明：这样的系统应是热均匀的，对非热均匀系统，则该表述不适用)。这也称为卡拉西奥多里定理、卡氏定理、喀氏定理、喀拉氏定理等。它是从熵增加原理得到的。

卡氏定理 Caratheodory theorem 即“卡拉西奥多里(热力学第二定律)表述”。

喀拉氏定理 Caratheodory theorem 即“卡拉西奥多里(热力学第二定律)表述”。

积分因子 integral factor 能使非态函数的微分元变为态函数微分元的因子(或称能使非全微分变为全微分的因子)。例如 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 不是全微分(或称 Q 不是态函数)，但乘以$(1/T)$因子后，$\bar{\mathrm{d}}Q/T$ 是全微分，(或称 $\bar{\mathrm{d}}Q/T=\mathrm{d}S$ 中的 S 是态函数)，我们称$(1/T)$是 $\bar{\mathrm{d}}Q$ 的积分因子。

热力学第二定律数学表达式 mathematical express of second law of thermodynamics $\mathrm{d}S\geqslant\bar{\mathrm{d}}Q/T$，其中等号适于可逆过程，不等号适于不可逆过程，$\mathrm{d}S$ 为在微过程中的熵变，$\bar{\mathrm{d}}Q$ 为在微过程中系统从热源吸的热，T 为系统的热力学温度。对于初态为 i、末态为 f 的非微过程，系统的熵变 ΔS 为

$$\Delta S\geqslant\int_i^f\frac{\bar{\mathrm{d}}Q}{T}\left(\begin{array}{l}\text{不等号为不可逆过程}\\ \text{等号为可逆过程}\end{array}\right)$$

利用 ΔS 的变化即可判别任一过程是可逆还是不可逆的。

能量退降 degradation of energy 见“熵增加原理”。

最大功原理 maximum work theorem 见“熵增加原理”。

最小功 minimum work 见“熵增加原理”。

热寂说 theory of heat death 认为宇宙最终将达到平衡态，因而宇宙将处于热寂(heat death)状态的学说。这是克劳修斯(R. Clausius)最早于1865年将熵增加原理应用于无限的宇宙中所提出的理论。他指出宇宙的能量是常数，宇宙的熵趋于极大，因而宇宙最终也将死亡。热寂说的基本出发点是宇宙最终将达到平衡态。按照宇宙膨胀学说，宇宙在不断膨胀之中，它最终有两种可能：(1)宇宙是开放的，即宇宙将永远膨胀下去；(2)宇宙是封闭的，即宇宙膨胀到一定时候会重新收缩，最后收缩到宇宙膨胀的原始出发点。由于自引力系统所经历的过程具有负热容特性，而这种负热容的系统不能满足稳定性条件，宇宙不可能处于平衡态，因而整个宇宙不可能处于“热寂”。

玻尔兹曼熵 Boltzmann entropy 以系统在某一状态时的热力学概率(即微观状态数)Ω 来表示系统在该状态的熵的表达式：$S=k\ln\Omega$，其中 k 为玻尔兹曼常量。该式也称为玻尔兹曼关系。这是玻尔兹曼(L. Boltzmann)于1872年提出输运方程(后称为玻尔兹曼输运方程)并引进 H 函数及 H 定理以后，对熵给出的一

个微观定义,也称为熵的统计诠释。不难看出,熵与 H 的关系是 $S=-kH$,即 H 函数"相当于"负熵。从以上的分析可见,熵增加原理的本质是概率的法则在起作用。关于该式的导出参见"玻尔兹曼关系"。

信息 information 现在人人都会用"信息"这一名词,但至今对信息尚未有确切定义。控制论奠基者维勒说:"信息就是我们适应外部世界和控制外部世界过程中,同外部世界进行交换的内容的名称",或者说信息是由声音、文字、图像等形式所表示的新闻、消息、情报等内容。信息、物质和能量被称为构成系统的三大要素。

信息论 information theory 由于信息的内涵十分广泛,很难对每一信息的价值作出准确的评价,不得已求其次,采用电报局的方法,不问其内容如何只计字数(即信息量),这就是信息论这门学科的基本出发点。信息论研究的不是信息的具体内容,而是信息的数量以及信息的转换、储存、传输所遵循的规律。

信息量 information content 由于信息的获得与情况的不确定度减少相联系,1948 年信息论创始人香农(Shannon)从概率的概念出发对信息量做出定义,假定一事件有 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ 种可能性,每一种结果出现的概率为 $P(x_i)$(或简写为 P_i),则该事件的信息量 $I=-\sum_{i=1}^{N} P_i \log_2 P_i$,对于等概率事件,$P_1=P_2=\cdots=P_N=1/N$,则 $I=-[(1/N)\log_2(1/N)+(1/N)\log_2(1/N)+\cdots+(1/N)\log_2(1/N)]=-\log_2(1/N)=\log_2 N$,这就是常用的计算信息量的公式。按照信息量的定义,获得 ΔI 的信息量后,不确定度减少,若可供选择的等概率事件的不确定度从 N 减为 M,则后者的信息量为 $I'=\log_2 M$。由于 ΔI 是获得的信息量,ΔI 应大于零,故 $\Delta I=I-I'=\log_2^N-\log_2^M$。

信息量的单位称为比特(bit),这是二进制数字(binary digit)的缩写。任一信息量的比特数就等于它以"2"为底的对数。

信息熵 information entropy 将熵的概念引用到信息论中的一种描述平均信息量的名词。由于香农对信息量的定义与"玻尔兹曼熵"的定义 $S=k\ln\Omega$ 十分类似,这说明信息就是熵的对立面。因为熵是体系的混乱度或无序度的数量,但获得信息却使不确定性减少,即减少系统的熵。为此,香农把熵的概念引用到信息论中,称为信息熵。信息论中对信息熵的定义是

$$S=-K\sum_{i=1}^{N} P_i \ln P_i \qquad (1)$$

信息熵的定义是从平均信息量得到的,因为式(1)可写为 $S=K\sum_{i=1}^{N} P_i \ln(1/P_i)$,$P_i$ 是 i 事件出现的概率,则 $\ln(1/P_i)$是 i 事件的不确定度,$K\ln(1/P_i)$是 i 事件的信息量,利用由概率求平均值的方法可知,由诸信息量与所对应的概率相乘后求和(此即式(1))就是平均信息量。等概率事件的概率 $P_1=P_2=\cdots=P_N=\frac{1}{N}$,所以(1)式所表示的信息熵为

$$S=K\ln N \qquad (2)$$

它与玻尔兹曼熵 $S=k\ln\Omega$ 十分相似,其不同仅在对数的底上,玻尔兹曼熵以"e"为底,而信息量以"2"为底($I=\log_2 N$),将信息量的式子与式(2)对照可知式(2)中的 $K=1/\ln 2=1.443$. 由于信息的利用(即信息量的欠缺)等于信息熵的减少,因而有

$$\Delta I=-\Delta S \qquad (3)$$

热力学指出,孤立系统的熵绝不会减少。相应地,信息量不会自发增加。例如在通信过程中不可避免受到外来因素干扰,使接收到的信息中存在噪声,信息变得模糊不清,致使信息量减少。

麦克斯韦妖 Maxwell demon 由麦克斯韦(J.C.Maxwell)虚构的、由"小妖精"所控制并能违背热力学第二定律的小盒子。该盒子被一个没有摩擦并能密封的门分隔为 A、B 两部分。最初两边气体温度、压强分别相等,门的开关被小妖精(后人称作麦克斯韦妖)控制。当它看到一个快速气体分子从 A 边飞来时,它就打开门让它飞向 B 边,而阻止慢速分子从 A 飞向 B 边;同样允许慢速分子(而不允许快速分子)从 B 飞向 A。这样就使 B 边气体温度越

来越高，A 边气体温度越来越低。若利用一热机工作于 B、A 之间则就可制成一部第二类永动机了。1929 年西拉德(Szilard)曾设想了几种由小妖精操纵的理想机器，并强调指出，机器作功的关键在于妖精取得分子位置的信息，并有记忆的功能。在引入信息等于负熵概念后，对此更易解释：小妖精虽未作功，但他需要有关飞来气体分子速率的信息。在他得知某一飞来分子的速率，然后决定打开还是关上门以后，他已经运用有关这一分子的信息。信息的运用等于熵的减少，系统熵的减少表现在高速与低速分子的分离。从对麦克斯韦妖这一假想过程的解释可知，若要不作功而使系统的熵减少，就必须获得信息，即吸取外界的负熵。但是在整个过程中总熵还是增加的。

信息处理消耗能量下限　dissipated minimum enegy in processing information　即信息熵与热力学熵间换算关系，布里渊(L.N.Brillouin)在解释麦克斯韦妖时即指出，如果没有足够的信息来控制分子的运动方向，“妖精”的活动就不可能，这种不消耗功的“妖精”是不存在的，为此，他利用玻尔兹曼关系 $S=k\ln\Omega$ 建立了信息和能量间的定量关系。他指出，在有 N 个等概率状态的物理系统中，若输入热量 Q，则所对应的信息熵的变化为 $\Delta S=Q/T=k\log N$，其中 k 为玻尔兹曼常量，T 为热力学温度。对于 $N=2$ 的等概率状态，则信息熵 $\Delta S=k\ln 2$，它等于 1bit，故 $1\text{bit}=k\ln 2\,\text{J/K}=0.957\times10^{-23}$ J/K。也就是说，在温度 T 时计算机每处理 1 个比特，电源至少要对计算机作 $kT\ln 2$ 的功，这部分功以热量形式向外释放，因而计算机减少 1bit 的信息熵。这一点说明了两个重要问题：(1)即使没有任何耗散等不可逆因素，维持计算机工作也存在一个能耗的下限，这一理论下限为每 bit 消耗 $kT\ln 2$ 的能量。但实际能耗的数量级要比它大很多，例如当代最先进的微电子元件，每 bit 的能耗在 10^8kT 量级以上。(2)即使没有任何耗散等不可逆因素，计算机工作时也必须向外散热以获得负熵。计算机处理的信息量越大，向外释放的热也越多。

生物熵　biological entropy　用来描述组成生物体的原子或分子的组成、排列、组合等的空间分布不同所反映出的生物体有序、无序性质的物理量。按照达尔文(C.G.Darwin)的进化论，生物是从低等向高等进化，即从无序向有序自发转化。若将玻尔兹曼关系同样用于生命过程，则与信息熵一样也可引入生物熵，在生命这种自发发生的过程中的生物熵是减少的。与信息等于负熵一样，我们也可把负熵的概念应用于生物中。决定生物遗传的脱氧核糖核酸(DNA)分子在按照亲代的遗传密码转录、翻译并复制后代的蛋白质分子的过程中就存在信息量的欠缺。按照信息熵的公式 $\Delta S=k\log N$，它造成了生物体熵的减少。

生物中的负熵(流)　biological negative entropic flow　生物中熵的减少是以环境熵的增加为代价的，故把这种熵的减少称为生物中的负熵流，或称为生物中的负熵。生物体的富集效应也是生物中负熵流的典型例子。如海带能富集海水中的碘原子，若设想一个模型，海水中的碘原子是在海水背景中的理想气体分子，则海带富集碘相当于把碘“气体”进行等温“压缩”。显然在这样的过程中碘原子系统的熵是减少的(也就是说碘从无序向有序转化)，这时海带至少必须向外释放 $T\Delta S$ 的热量。注意到理想气体等温压缩中外界要对系统作功，但在海带富集碘的过程中外界并未作功，而是利用了一定的信息量(即造成信息的欠缺)，从而使海带的熵减少。从海带富集碘这一例子可清楚地看到，生命体是吸取了环境的负熵而达到自身熵的减少的。在这里“吸取环境的负熵”可理解为是向外界放热或采用其他的形式。地球上的生命需要太阳辐射。但生命并非靠入射能量流来维持，因为入射的能量中除微不足道的一部分外都被辐射掉了，如同一个人尽管不断地汲取营养，却仍维持不变的体重。我们的生存条件是需要恒定的温度，为了维持这个温度，需要的不是补充能量，而是降低熵。生命体要维持生命的关键是不断从环境吸取负熵。以人类为例，人可数天不吃不喝，但不能停止心脏跳动或停止呼吸。为了维持心肌和呼吸肌的正常作功，要供给一定的能量，这些能量耗散变为热量。而人体生存的必要条件是维持正常的体温，所以要向外释放热

量(也即从环境吸取负熵)。人虽然能数天不吃不喝,但不能数天包在一个绝热套子内,既不向外散发热量,也不与外界交换物质(如呼吸)。这说明了,生命是一个开放的系统,它的存在是靠与外界交换物质和能量流来维持的,如果切断了它与外界联系的纽带,则无异于切断了它的生命线。从外界吸取负熵就是一条十分重要的纽带。

二、分子动理学理论
Kinetic Theory

分子动理学理论 kinetic theory 热物理学微观理论的一个重要组成部分。

热物理学的微观理论是在分子动(理学)理论(简称分子动理论,按照国家有关规定,已将"分子运动论"、"分子动力论"等物理学名词统一改称为分子动理论)基础上发展起来的。早在1738年伯努利(D.Bernoulli)曾设想气体压强是由分子碰撞器壁而产生的。1744年俄罗斯科学家罗蒙诺索夫提出热是分子运动的表现,他把机械运动的守恒定律推广到分子运动的热现象中去。到了19世纪中叶,原子和分子学说逐渐取得实验支持,将哲学观念具体化发展为物理理论,热质说也日益被分子运动的观点所取代,在这一过程中统计物理学开始萌芽。1857年克劳修斯首先导出了气体压强公式。1859年麦克斯韦导出了速度分布律,由此可得到能量均分定理,以上就是分子动理论的平衡态理论。后来,玻尔兹曼提出了熵的统计解释以及 H 定理;1902年吉布斯(J.W.Gibbs)在其《统计力学的基本原理》之名著中,建立了平衡态统计物理体系,称为吉布斯统计(后来知道,这个体系不仅适于经典力学系统,甚至更自然地适用于服从量子力学规律的微观粒子,与此相适应建立起来的统计力学称为量子统计);此外还有非平衡态统计物理学。上述三方面的内容都是在分子动理论基础上发展起来的。

分子动理论方法的主要特点是:它考虑到分子与分子间、分子与器壁间频繁的碰撞,考虑到分子间有相互作用力,利用力学定律和概率论来讨论分子运动及分子碰撞的详情。它的最终及最高目标是描述气体由非平衡态转入平衡态的过程。而后者是热力学的不可逆过程。热力学对不可逆过程所能叙述的仅是孤立体系的熵的增加,而分子动理论则企图能进而叙述一个非平衡态气体的演变过程。诸如:①分子由容器上的小孔逸出所产生的泻流;②动量较高的分子越过某平面与动量较低的分子混合所产生的与黏性有关的分子运动过程;③动能较大的分子越过某平面,与动能较小的分子混合所产生的与热传导有关的过程;④一种分子越过某平面与其他种分子混合的扩散过程;⑤流体中悬浮的微粒受到从各方向来的分子的不均等冲击力,使微粒作杂乱无章的布朗运动;⑥两种或两种以上分子间以一定的时间变化率进行的化学结合,称为化学反应动力学。

从广义上来说,统计物理学是从对物质微观结构和相互作用的认识出发,采用概率统计的方法来说明或预言由大量粒子组成的宏观物体的物理性质。按这种观点,分子动理论也应归属于统计物理学的范畴。但统计物理学的狭义理解仅指玻尔兹曼统计与吉布斯统计,它们都是平衡态理论,至于分子动理论,则仍像历史发展中那样把它看做一个独立的分支理论。统计物理与分子动理论都可认为是一种基本理论,它们都作一些假设(例如微观模型的假设),其结论都应接受实验的检验,故其普遍性不如热力学。气体分子动理论在处理复杂的非平衡态系统时,都要加上一些近似假设。

分子运动论 kinetic theory 即分子动理论,见"分子动理学理论"。

分子动力论 kinetic theory 即分子动理论,见"分子动理学理论"。

气体分子运动论 gas-kinetic theory 即分子动理论,见"分子动理学理论"。

气体分子动理论 gas kinetic theory 即气体分子动理学理论,也称"分子动理学理论"。

分子动理论 kinetic theory 即分子动理学理论。

理想气体微观模型 microscopic model of ideal gas 对理想气体微观结构的基本假定。要从微观上讨论理想气体,先应知道其微观结构。实验证实对理想气体可作如下假定:①分子本身线度比起分子之间距离小得多而可忽略不计;②除碰撞瞬间外,分子间互作用力可忽略不计,分子在两次碰撞之间作自由的匀速直线运动;③处于平衡态的理想气体,分子之间及分子与器壁间的碰撞是完全弹性碰撞,即气体分子动能不因碰撞而损失,在各类碰撞中动量守恒、动能守恒。

以上就是理想气体微观模型的基本假定,热学的微观理论对理想气体性质的所有讨论都是建立在上述三个基本假定的基础上的。

理想气体基本假定 primary assumption of ideal gas 见“理想气体微观模型”。

压强 pressure

(一)力学中的压强概念

通过连续介质中某一点其坐标为 x、y、z 的 O 点,在 O 点附近隔离出一小块面积 ΔA。设 t 时刻作用在 ΔA 上的全部作用力在 ΔA 内法线方向上的投影为 ΔF,则 ΔF 与 ΔA 之比就是在 O 点受到的压强 p,即

$$p=\lim_{\Delta A\to 0}\frac{\Delta F}{\Delta A}=p(x,y,z,t)$$

在流体静力学中及无黏性流体力学中,据帕斯卡(Pascal)原理,流体中在同一点向各方向所施的压强相等。在黏性流体力学中,在 ΔA 面积上除有法向作用力外,还可有与黏性有关的数值较小的法向应力。在固体力学中还有所谓应力,这时的压强 p 与法线方向的应力间有显著区别。

(二)热学中的压强概念——气体动理压强

在热学中,压强表示单位时间内气体分子由于碰撞施于单位面积器壁的平均总冲量。这一概念也可被推广应用于气体内部,其压强是单位时间内,在气体内部所设想的单位面积上两边气体所施的力的合力。这种力是由于单位时间内气体分子在截面上进进出出产生动量改变所引起(例如,若以截面左侧为研究对象,则分子从左侧穿过截面进入右侧时将致使动量减少,反之则动量增加)。气体施于器壁的压强或气体内部的压强均称为气体动理压强。

(三)理想气体压强公式

对于理想气体,表示气体动理压强的公式称为理想气体压强公式。推导气体压强公式的方法可有多种,这里采用最为简便的近似证法。先作两条简化假设:(1)处于平衡态的长方容器中,若气体分子数密度为 n,则该容器单位体积中垂直指向任一器壁运动的平均分子数均为 $n/6$。(2)每一分子均以平均速率 $\bar{v}$ 运动。由于每一分子均以 $\bar{v}$ 速率垂直于某一器壁运动,则 Δt 时间内碰撞在某器壁的 ΔA 面积上的平均分子数 ΔN 等于以 ΔA 为底,$\bar{v}\Delta t$ 为高的立方体中所有向该器壁运动的分子数。所以 $\Delta N=\Delta A\cdot\bar{v}\Delta t\times n/6$。若每个分子与器壁碰撞是完全弹性的,每次碰撞产生 $2m\bar{v}$ 的动量改变(即向器壁施予 $-2m\bar{v}$ 的冲量),则 Δt 时间内 ΔA 面积器壁所受到的平均总冲量 $=[(1/6)n\bar{v}\Delta A\Delta t]\times[2m\bar{v}]$。单位时间的总冲量是力,单位面积的力是压强,故

$$p=(1/6)n\bar{v}\cdot 2m\bar{v}\approx(1/3)nm\overline{v^2}$$

虽然这是对长方容器的特例作出的推导,而且作了两点简化假设及利用了$(\bar{v})^2\simeq\overline{(v^2)}$的近似条件,但利用严密的理论导出的理想气体压强公式是与式(1)完全一致的。

(四)压强的单位及其换算

300 多年来,对压强概念的认识在不断深化,在实验和使用中积累了大量资料。各国在历史上广泛采用各自不同的单位制,近数十年才趋于统一用国际单位制(SI 制),其单位是帕(Pa),$1\ \mathrm{Pa}=1\ \mathrm{N\cdot m^{-2}}$。但由于历史原因,在气象学、医学、工程技术等领域的文献中常用一些其他单位,如:巴(bar)、毫米汞柱(mmHg)或称托(Torr)、毫米水柱($\mathrm{mmH_2O}$)、标准大气压(atm)、工程大气压(at)、千克力每平方厘米($\mathrm{kgf\cdot cm^{-2}}$)、千克力每平方毫米($\mathrm{kgf\cdot mm^{-2}}$)、磅力每平方英寸($\mathrm{lbf\cdot in^{-2}}$)、磅力每平方英尺($\mathrm{lbf\cdot ft^{-2}}$)等,其单位主要换算关系如下:

$$1\ \mathrm{Pa}=1\ \mathrm{N\cdot m^{-2}}=1.451\times10^{-4}\ \mathrm{lbf\cdot in^{-2}}$$

$=0.209\ \mathrm{lbf\cdot ft^{-2}}$

$1\ \mathrm{bar}=10^5\ \mathrm{Pa}$

$1\ \mathrm{lbf\cdot in^{-2}}=6891\ \mathrm{Pa}$

$1\ \mathrm{lbf\cdot ft^{-2}}=47.85\ \mathrm{Pa}$

$1\ \mathrm{atm}=1.013\times10^5\ \mathrm{Pa}=1.013\ \mathrm{bar}$

$=14.7\ \mathrm{lbf\cdot in^{-2}}=2117\ \mathrm{lbf\cdot ft^{-2}}$

$1\ \mathrm{mmHg}=1\ \mathrm{Torr}=133.3\ \mathrm{Pa}$

力学中的压强概念 concept of pressure in mechanics 见“压强”。

热学中的压强概念 concept of pressure in thermophysics 见“压强”。

气体动理压强 kinetic pressure of gas 见“压强”。

理想气体压强公式 pressure formula of gas 见“压强”。

压强的单位 units of pressure 见“压强”。

分子间吸引力与排斥力 intermolecular attractive force and repulsive force 很多现象说明分子间存在相互吸引力。液体汽化时所吸收的汽化热中就有一部分用于克服分子间吸引力作功。破碎的玻璃无法接合，但玻璃熔化后经过接触挤压即能接合，这说明只有当分子的质心相互接近到某一距离之内，分子间吸引力才较显著，这一距离称为分子作用力半径；很多物质的分子作用力半径约为分子直径的2～4倍左右。

若分子间仅有相互吸引力，则分子会无限靠近而受到压缩，最后压缩为一个几何点。固体、液体能保持一定体积而很难压缩，这正说明分子间不仅有吸引力，而且还存在排斥力。可利用固体的体积、固体中的分子数及固体的微观结构估计出固体分子的平均间距，这一间距也就是分子引力与斥力达到平衡时的距离。分子经过碰撞而相互远离也是排斥力的作用。排斥力也有作用半径。只有两分子相互“接触”、“挤压”时才呈现出排斥力。可简单认为排斥力作用半径就是两分子刚好“接触”时两质心间的距离，对于同种分子，它就是分子的直径。因为吸引力出现在两分子相互分离时，故排斥力作用半径比吸引力半径小。液体、固体受到外力压缩而达平衡时，排斥力与外力平衡。从液体、固体很难压缩（例如施加4万大气压才能使水的体积减少为1/3）这一点可说明排斥力随分子质心间距的减少而剧烈地增大。

分子间势能曲线 intermolecular potential energy curve 表示两分子间互作用势能随质心间距离变化的曲线。

（1）分子作用力曲线 既然两分子相互“接触”时分子排斥力占优势，相互分离时分子间吸引力占优势，则两分子质心间应存在某一平衡距离 r_0，在该距离分子间相互作用力将达平衡。为便于分析，常设分子是球形的，分子间的互作用是球形对称的中心力场。现以两分子质心间距离 r 为横坐标，两分子间作用力 $\boldsymbol{F}(r)$ 为纵坐标，画出两分子间互作用力曲线，如图1之上图所示。在 $r=r_0$ 时分子力为零，相当于两分子刚好“接触”。当 $r<r_0$ 时，两分子在受到“挤压”过程中产生强斥力，这时 $F(r)>0$ 且随 r_0 减少而剧烈增大。当 $r>r_0$ 时两分子分离，产生吸引力，$F(r)<0$。当 r 增加到超过某一距离时，吸引力很小将趋近于零，可称这一距离为分子作用力半径。

（2）分子间势能曲线 分子力是一种保守力，而保守力所作负功等于势能 E_p 的增量，故分子作用力势能的微小增量为

$$\mathrm{d}E_p(r)=-F(r)\mathrm{d}r \tag{1}$$

或

$$F=-\mathrm{d}E_p/\mathrm{d}r \tag{2}$$

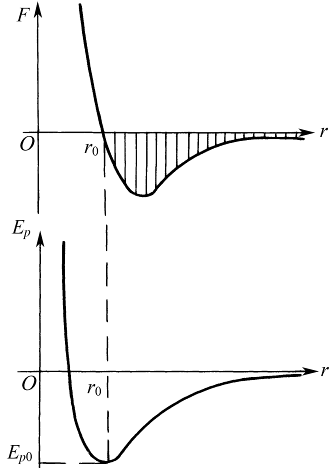


图1

若令 $r\to\infty$ 时的势能 $E_p(\infty)=0$，则分子间距离为 r 时的势能为

$$E_p(r)=-\int_{\infty}^{r}F(r)\mathrm{d}r \qquad (3)$$

利用(1)式，可作出与图 1 之上图分子力曲线所对应的互作用势能曲线 $E_p(r)\sim r$，如图 1 之下图所示。例如，上图中打上竖条的面积就是在平衡位置 $r=r_0$ 时的势能 E_{p0}，它是负的。图 1 下图的纵轴上已标出 E_{p0}，并画出利用(3)式所求得的势能曲线。将图 1 的上、下图相互对照可知，在平衡位置 $r=r_0$ 处，分子力 $F=0$，故 $-\mathrm{d}E_p/\mathrm{d}r=0$，势能有极小值。在平衡位置以外，即 $r>r_0$ 处，$F<0$，势能曲线斜率 $-\mathrm{d}E_p/\mathrm{d}r$ 是正的，这时是吸引力。在平衡位置以内，即 $r<r_0$ 处，$F>0$，势能曲线有很陡的负斜率，相当于有很强斥力。两分子在平衡位置附近的吸引和排斥，和弹簧在平衡位置附近被压缩和拉伸类似，液体和固体中分子的振动就是利用分子力这一特性来解释。由于用势能来表示相互作用要比直接用力来表示相互作用方便有用，所以分子互作用势能曲线常用到。

利用分子势能曲线能定性分析在分子之间对心碰撞、分子与器壁间碰撞过程中分子力是如何起作用的，定性分析固体在形变时的弹性力是如何产生的，以及固体为什么会发生热膨胀现象等。

分子作用力曲线 intermolecular action force curve　见“分子间势能曲线”。

分子作用半径 radius of molecular action sphere　见“分子间势能曲线”。

自由度 degree of freedom

(一)力学中的自由度

力学中定义自由度为能单值地确定一力学体系的运动状态所必须的互相独立并可自由变动的物理量数目，也就是能自由变动的独立坐标数目。例如一个质点的自由度是 3，N 个质点的力学体系的自由度是 $3N$。但是一个刚体只有三个平动和三个转动的独立坐标，其自由度是 6。虽然刚体由 N 个分子组成，但由于描述粒子之间因相对位置改变而发生的简正振动的$(3N-6)$个独立坐标全被冻结，因而其自由度数只剩 6 个。自由度不仅可因被冻结而减少，也可因被约束而减少，例如若一质点被限制在一曲线上运动，则其自由度仅为 1，另两个自由度被约束而不能自由变动，这称为自由度的约束。

(二)热学中的自由度

在热学中，常描述单个粒子(分子或原子)的运动，这仍然是个力学问题。但由于它特别要区分是平动的、转动的还是振动的独立坐标，因而把能自由变动的独立坐标称为自由度(例如平动自由度，沿 x 方向运动的平动自由度等等)，而把能自由变动的独立坐标数称为自由度数，例如单原子分子的自由度数为 3，双原子分子有三个平动、两个转动、一个振动自由度，其自由度数是 6，刚性双原子分子由于振动自由度已被冻结，其自由度数是 5。

(三)内部自由度与非弹性碰撞

某些自由度可隐藏在体系内部，它仅在一定条件下才被激发出来，处于这种状态下的自由度称为内部自由度。例如对于宏观物体，其内部分子或原子的热运动相对于物体的整体运动来说可被看做是物体的内部自由度或其他自由度的运动。而耗散过程则是物体宏观运动的能量向内部自由度或其他自由度转移的过程。微观粒子也可有它自己的内部自由度。微观粒子在碰撞时其平动能量可向振动能量转变。例如微观粒子碰撞固体时，固体可产生或吸收声子，又如原子碰撞时也可导致其中的电子激发。这种导致内部自由度激发的碰撞称为非弹性碰撞，这是在微观领域对非弹性碰撞的理解。

自由度数 number of degree of freedom　见“自由度”

内部自由度 internal degree of freedom　见“自由度”之(三)。

非弹性碰撞 inelastic collision　在宏观上认为，非弹性碰撞是伴随有机械能向热运动能量等其他形式能量转移的碰撞，在微观上所理解的非弹性碰撞是指导致内部自由度激发的碰撞。(见“内部自由度”)。

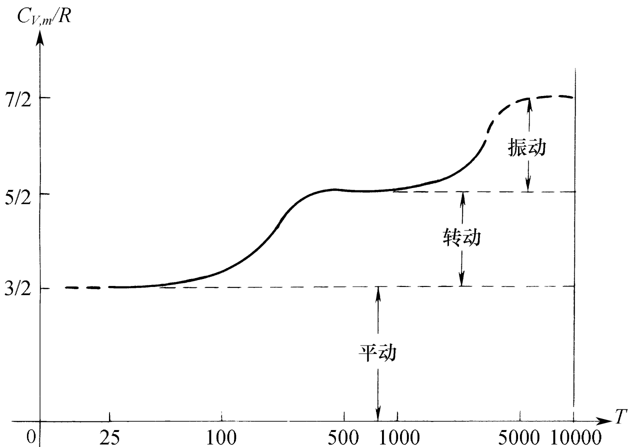
能量按自由度均分定理 theorem of equipartition of energy according to freedom degree　简

称能量均分定理或能均分定理。它表述为：在处于温度为 T 的平衡态的气体中，分子热运动动能平均分配到每一个分子的每一个自由度上，每一个分子的每一个自由度的平均动能都是 $\frac{kT}{2}$。能量均分定理仅限于均分平均动能。对于振动能量，除动能外，还有由于原子间相对位置变化所产生的势能。由于分子中的原子所进行的振动都是振幅非常小的微振动，可把它看做简谐振动。在一个周期内，简谐振动的平均动能与平均势能都相等，所以对于每一分子的每一振动自由度，其平均势能和平均动能均为 $\frac{kT}{2}$，故一个振动自由度均分 kT 的能量，而不是 $\frac{kT}{2}$。若某种分子有 t 个平动自由度、r 个转动自由度、v 个振动自由度，则每一分子的总的平均能量的

$$\varepsilon=(t+r+2v)\cdot\frac{1}{2}kT=\frac{1}{2}ikT$$

其中 $i=t+r+2v$。需要强调：(1)上式中的各种振动、转动自由度都应是确实对能量均分定理作全部贡献的自由度，因为自由度会发生"冻结"(参见"能量均分定理的局限")。(2)只有在平衡态下才能应用能量均分定理，非平衡态不能应用能量均分定理。(3)能量均分定理本质上是关于热运动的统计规律，是对大量分子统计平均所得结果，这可以利用统计物理作严格证明。(4)能量均分定理不仅适用于理想气体，一般也可用于液体和温度足够高下的固体，也可用于布朗粒子。(5)对于气体，能量按自由度均分是依靠分子间大量的无规碰撞来实现的。对于液体和固体，能量均分则是通过分子间很强的相互作用来实现的。

能量均分定理的局限 the limitations of theorem of equipartition of energy 能量均分定理有很大的局限性，即便对于理想气体，其定体热容也不是常数。实验指出，在温度变化范围较大时，双原子气体的 $C_{V,m}$ 随温度升高而阶梯形增加。如图表示了氢气的 $C_{V,m}$ 随温度而变化的情形。在低温时它的 $C_{V,m}$ 为 $\frac{3R}{2}$，在常温时为 $\frac{5R}{2}$，只有在温度非常高时才看来有点接近 $\frac{7R}{2}$，但是在温度还未升到能足够显示 $C_{V,m}=\frac{7R}{2}$ 时，氢分子已热离解为氢原子了。实验显示其他双原子分子气体的 $C_{V,m}$ 也有与氢气相类似的变化情形。



氢气 $C_{V,m}$-T 曲线

如何来解释上述矛盾呢？如前所述，对于理想气体分子，它不仅有热运动平动动能，还有热运动转动动能与热运动振动动能、振动势能。由能量按自由度均分定理可知，多原子理想气体的定体热容为

$$C_V = C_V^t + C_V^r + C_V^v = \frac{1}{2}Nk(t + r + 2v)$$

其中 C_V^t、C_V^r、C_V^v 分别为 N 个分子的平动、转动、振动自由度对定体热容的贡献。上式表示每一分子的每一平动或转动自由度对定体热容的贡献均为 $k/2$，每一分子的每一振动自由度对定体热容的贡献均为 k。因为系统中 N 个分子都对热容作贡献，所以还要乘以 N。实际上，并非每一分子的每一个自由度都对热容作贡献。热容可以被“冻结”。只要某一分子的某一自由度已被“冻结”，则这一分子的这一自由度对定体热容就不作贡献；也并非所有分子的同一自由度同时被“冻结”或同时被“解冻”。自由度的“冻结”或“解冻”都是在某一特定温度范围内逐渐进行的。不同种类的分子，同种分子的不同种类自由度被“冻结”或“解冻”的温度范围也各不相同。利用自由度“冻结”的理论还能很成功地解释经典的能量均分定理所不能解释的其他热容反常现象。自由度被冻结的物理原因是，分子的转动能量与振动能量是量子化的，即其能量不能连续变化而是分能级的。在此假定下，利用统计物理即能很好地说明理想气体的定体热容是随温度变化的，说明转动自由度与振动自由度都会发生“冻结”或“解冻”。

能[量]均分定理　theorem of equipartition of energy　即“能量按自由度均分定理”。

自由度的冻结　freezing of freedom degree　见“能量均分定理的局限”。

输运过程　transport process　是指在非平衡条件下，由于系统中分别存在定向运动动量、温度、粒子数密度或电场强度等的空间不均匀性，因而发生定向动量、能量、质量或电量等的传递（或交换）的过程，也称为迁移过程。在输运过程中所发生的现象称为输运现象。

在气体中，由于存在分子的定向运动动量的空间不均匀性而发生的定向运动动量的输运现象称为黏性现象；由于存在温度的空间不均匀性而发生的分子热运动能量输运现象称为热传导现象；在存在分子数密度的空间不均匀性时，由于分子的热运动而发生的质量的输运，称为扩散现象；在存在电场强度空间不均匀性时发生的电量的输运称为电导现象。

一个孤立系统，经过足够长时间后最终将达到平衡态，其定向运动动量、温度、分子数密度及电场强度等的空间不均匀性最终将趋于消失。

输运现象　transport phenomena　在输运过程中所发生的现象，参见“输运过程”。

迁移现象　transport phenomena　即输运过程中所发生的现象，参见“输运过程”。

层流　liminal flow　当流体流速足够小时，流体将作分层平行流动，流体质点的轨迹（一般说它随原始空间坐标 x、y、z 和时间 t 而变）是有规则的光滑曲线（最简单的情形是直线）在流动过程中，相邻质点的轨迹线彼此仅稍有差别，不同流体质点的轨迹线不相互混杂，这样的流动称为层流，流体在平直水平圆管中层流流动时，流速随径向作抛物线形分布。层流仅发生在流速相对较小时。在层流时一旦发生随机扰动，随着时间增长其扰动会逐渐衰减，使流体仍能维持较稳定的分层流动。但是当流体的雷诺数 Re 超过某一临界值 Re_{cr}（称为临界雷诺数）时，流体流动将变为湍流。

湍流　turbulence flow　流体的一种不规则流动，其流速的方向和大小均随时间发生随机的紊乱变化和相互混杂，在时间和空间上都有脉动，流体微团的轨迹极其紊乱。湍流只在雷诺数 Re 较大时才发生，从层流向湍流过渡时的雷诺数称为临界雷诺数。对于长直圆管，其临界雷诺数约为 2300～2800，小于该值时的流动为层流，大于该值时的流动为湍流。

湍流利弊兼有。一方面，这种随机流动引起的动量、热量和质量的传输，其传输速率比层流高数个数量级，因而能强化传递和反应过程。另一方面，它也极大地增加摩擦阻力和能量损耗。鉴于湍流是自然界和各种技术过程中普遍存在的流动状态（如风和河中的水流，

飞行器和船舶表面附近的绕流，流体机械中流体的运动，燃烧室、反应器和换热器中工质的运动，污染物在大气和水体中的扩散等），故研究、预测和控制湍流是认识自然现象、发展现代技术的重要课题之一。

雷诺数 Reynolds number 一种可用来表征流体流动情况的无量纲数，以 Re 表示，$Re=\rho vr/\eta$，其中 v、ρ、η 分别为流体的流速、密度与黏性系数，r 为一特征线度。例如流体流过圆形管道，则 r 为管道半径。利用雷诺数可区分流体的流动是层流或湍流，也可用来确定物体在流体中流动所受到的阻力。例如，对于小球在流体中的流动，当 Re 比“1”小得多时，其阻力 $f=6\pi r\eta v$（称为斯托克斯公式），当 Re 比“1”大得多时，$f'=0.2\pi r^2 v^2$ 而与 η 无关。

牛顿黏性定律 Newton law of viscosity 也称牛顿黏滞定律，是描述流体中黏性现象的宏观规律。黏性也称黏滞，是指流体中由于存在定向运动速度的不平均性时，在流体中出现一种使流动较快的流体受到减速力，流动较慢的流体受到加速力的现象（即内摩擦现象）。这种减速力及加速力统称为黏性力（或黏滞力、内摩擦力）。牛顿黏性定律可表述为：当流体的流动为层流时，则在层与层之间所作用的黏性力 f 分别与流体中定向运动的速度梯度 $\mathrm{d}u/\mathrm{d}z$ 及与流动方向切向面积 A 成正比的关系，其比例系数 η 称为黏度或黏性系数，即

$$f=-\eta\cdot\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}\cdot A$$

η 的单位是 $\mathrm{N\cdot m^{-2}\cdot s}$，也有用泊（poise）为单位的，1 泊（P）$=10^{-1}\mathrm{kg\cdot m^{-1}\cdot s^{-1}}$。下表列出了一些流体的黏性系数。

各种流体的黏性系数表

流体	t/℃	η/（mPa·s）	流体	t/℃	η/（mPa·s）	流体	t/℃	η/（mPa·s）
水	0	1.7	甘油	0	10,000	水汽	0	0.0087
	20	1.0		20	1,410	CO_2	20	0.0127
	40	0.51		60	81	H_2	20	0.0089
血液	37	4.0	空气	0	0.0171	N_2	0	0.0167
机油（SAE10）	30	200		20	0.0182	O_2	0	0.0199
蓖麻油	20	9860		40	0.193	CH_4	0	0.0103

牛顿黏滞定律 Newton's law of viscosity 即“牛顿黏性定律”。

黏性系数 viscosity coefficient 描述流体黏性大小的物理量，也称黏度、黏滞系数、动力黏度。其单位为泊（poise）；见“牛顿黏性定律”。

黏[滞]度 viscosity 即“黏性系数”。

动力黏[滞]度 kinetic viscosity 即“黏性系数。”

泊 poise 黏性系数的单位，见“牛顿黏性系数”。

黏性力 viscosity force 也称黏滞力、内摩擦力，见“牛顿黏性定律”。

牛顿流体 Newtonian fluid 指能遵从牛顿黏性定律的流体。

非牛顿流体 non-Newtonian fluid 不遵从牛顿黏性定律的流体。它分为三类：（1）其速度梯度和与之相垂直的黏性力间不呈线性函数关系，如泥浆、橡胶、血液等；（2）其黏性系数会随时间而变或与流体此前的历史过程有关（这都称之为时效），如油漆等凝胶物质；（3）对形变具有部分弹性恢复作用，如沥青等黏弹性物质。

扩散现象 diffusion phenomena 由于气体中某种分子的数密度的空间分布不均匀，使该种气体分子从数密度较大区域自发地迁移到数密度较小的区域的现象。扩散有互扩散、自

扩散、热扩散、热流逸及强制扩散等形式。

(1)互扩散　例如把一容器用隔板分隔为左、右两部分,其中分别装有两种不会产生化学反应的气体 A 和 B。两部分气体的温度、压强均相等,因而气体分子数密度也相等。若把隔板抽除,左边的 A 气体将向右边的 B 气体中扩散,同样右边的 B 气体将向左边 A 气体中扩散。经过足够长时间后,两种气体都将均匀分布在整个容器中,这就是互扩散。由于发生互扩散的两种气体分子的大小、形状可能不同,它们的扩散速率也可能不同,所以互扩散仍是较复杂的过程。

(2)自扩散　是一种使发生互扩散的两种气体分子之间的差异尽量变小,使它们相互扩散的速率趋于相等的互扩散过程。较为典型的自扩散例子是同位素之间的互扩散。因为同位素原子仅有核质量的差异,核外电子分布及原子的大小均可认为相同,因而扩散速率几乎是一样的。例如若在 CO_2 气体(其中碳为 ^{12}C)中含有少量的碳为 ^{14}C 的 CO_2,就可研究后者在前者中由于浓度不同所产生的扩散。具有放射性的 ^{14}C 浓度可利用 β 衰变仪检测出。

(3)热扩散　1879 年索里特(Soret)发现物质两端的温度差也可引起扩散流。其扩散通量密度(在单位时间内在单位截面积上扩散的粒子数)

$$J_{NT}=-D_T(n/T)\mathrm{d}T/\mathrm{d}x \qquad (1)$$

其中 J_{NT} 的下角 N 表示是粒子数的输运,下角 T 表示是热扩散,而 D_T 为热扩散系数,其单位仍为 $m^2 \cdot s^{-1}$, n 为摩尔分子数密度, T 为热力学温度(K)。D_T 的值视分子的大小及化学性质而定,一般都不及扩散系数的 30%,所以只在温度梯度很大且无湍动时,热扩散才显得重要。热扩散在同位素分离中有重要应用。这里所提到的热扩散均指在气体压强不是很低时发生的,由温度差引起的扩散。

(4)热流逸现象　在气体压强足够低时发生的热扩散现象。若有 A、B 两个容器以小孔相连通,在连通前 A、B 容器中气体的温度、压强、分子数密度分别为 T_1、p_1、n_1 及 T_2、p_2、n_2。在 p_1、p_2 较高,即它们的分子平均自由程 $\bar{\lambda} \ll$ 小孔直径 d 时,则连通后达稳态时两容器压强应相等。但是在 p_1、p_2 足够小,且其平均自由程均有 $\bar{\lambda} > d$ 时,连通后所达的稳态,其两边压强不等,原因如下:由于泻流, A 容器中从小孔逸出进入 B 中分子数应等于从 B 中逸出进入 A 中分子数。而泻流逸出的分子数也就是当小孔闭合时的气体分子碰壁数。若小孔截面积为 S,则达稳态时有 $\frac{1}{4}n_1\bar{v}_1S=\frac{1}{4}n_2\bar{v}_2S$,其中 $\bar{v}_1$、$\bar{v}_2$ 分别为 A、B 容器中气体分子平均速率。由于 $p_1=n_1kT_1$, $p_2=n_2kT_2$,故 $\frac{p_1}{\sqrt{T_1}}=\frac{p_2}{\sqrt{T_2}}$。由此可看到,由于小孔两边气体温度不同,使达稳态后小孔两边气体压强也不等。这与通常开孔较大时,孔两边的气体压强最后趋于相等的情况截然不同。这种由于气体压强不同而导致气体温度也不同的现象称为热分子压差,或称为热流逸现象。

(5)强制扩散　是在外界条件影响下产生的扩散,例如离子在电场中的游动就是强制扩散,其通量密度为

$$J_{Nm}=nU\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} \qquad (2)$$

其中 V 为电压(V), U 为组分的运动度(单位为 $m^2 \cdot s^{-1} \cdot V^{-1}$)与扩散系数相当,其值因离子的种类、溶剂的性质和温度而异。25℃的稀水溶液,除 H^+ 和 OH^- 外,此值一般在 $3\times10^{-8} \sim 8\times10^{-8} m^2 \cdot s^{-1} \cdot V^{-1}$)。

自扩散　self-diffusion　见“扩散现象”。

互扩散　inter-diffusion　见“扩散现象”。

热扩散　thermal diffusion　见“扩散现象”。

热流逸现象　thermal transpiration phenomenon　见“扩散现象”。

热分子压差　thermomolecular pressure difference　即“热流逸现象”,见“扩散现象”。

强制扩散　forced diffusion　见“扩散现象”。

菲克定律　Fick law　描述气体扩散现象的宏观规律,这是生理学家菲克(Fick)于 1855 年发现的。菲克定律认为粒子流密度(即单位时间内在单位截面积上扩散的粒子数) J_n 与粒子数密度梯度 $\mathrm{d}n/\mathrm{d}z$ 成正比,即

$$J_n = -D\frac{dn}{dz} \quad (1)$$

其中比例系数 D 称为扩散系数，其单位为 $m^2 \cdot s^{-1}$。式中负号表示粒子向粒子数密度减少的方向扩散。菲克定律不仅适用于自扩散，也适用于互扩散，不过此时 D 表示某两种粒子之间的互扩散系数。若在与扩散方向垂直的流体截面上的 J_n 处处相等，则在式(1)两边各乘以流体的截面积及扩散分子的质量，即可得到单位时间内气体扩散的总质量 $\frac{\Delta M}{\Delta t}$ 与密度梯度 $d\rho/dz$ 之间的关系

$$\frac{\Delta M}{\Delta t} = -D\frac{d\rho}{dz} \cdot A \quad (2)$$

下表中列出了各种气体的自扩散系数与互扩散系数。菲克定律不仅在物理学中，而且在化学、生物学中都有重要应用。

气体的扩散系数表(标准大气压、常温)

气　　体	自扩散 $D/(10^{-4}m^2 \cdot s^{-1})$	气　　体	互扩散 $D_{12}/(10^{-4}m^2 \cdot s^{-1})$
H_2	1.28	H_2-O_2	0.679
O_2	0.189	H_2-N_2	0.793
CO	0.175	H_2-CO_2	0.538
CO_2	0.104	O_2-N_2	0.174
Ar	0.158	O_2-空气	0.178
N_2	0.200	空气-H_2O	0.203
Ne	0.473	空气-CO_2	0.138

扩散系数　diffusion coefficient　见“菲克定律”。

热传递　heat transfer　在没有作功而只存在温度差时，能量从一个物体转移到另一物体，或从物体的一部分转移到另一部分的现象。在热传递过程中转移的能量称为热量。热传递有三种基本形式：热传导、热对流与热辐射。一般情况下，这三种传热形式同时并存，因而比较复杂，但对于固体热源，当它与周围媒质的温度差不太大(约 50℃以下)时，热源向周围传递的热量 Q 是与温度差成正比的，其经验公式就是牛顿冷却定律。

$$Q = hA(T - T_0)$$

式中 T_0 为环境温度，T 为热源温度，A 为热源表面积，h 为一与传热方式等有关的常数，称热适应系数。对于一结构固定的物体(例如某一建筑物，也可将上式写为如下形式)

$$Q = a(T - T_0)$$

下表中列出了一些 h 的数值。

自然对流热适应系数 h 的数值表(1.01×10^5Pa 空气中)

装　　置	热适应系数/$(J \cdot s^{-1} \cdot cm^{-2} \cdot ℃^{-1})$
水平板(面向上)	$2.49\times10^{-4}(\Delta T)^{1/4}$
水平板(面向下)	$1.31\times10^{-4}(\Delta T)^{1/4}$
竖直板	$1.77\times10^{-4}(\Delta T)^{1/4}$
水平板或竖直管 (直径为 d，d 以 cm 为单位)	$4.18\times10^{-4}(\Delta T/d)^{1/4}$

牛顿冷却定律 Newton cooling law 见“热传递”。

热适应系数 thermal accommodation coefficient 牛顿冷却定律中的一个比例系数，见“热传递”。

热传导 heat conduction 不是依靠物质的宏观运动，而是借助分子、原子、电子等相互作用所产生的热传递过程，在气体、液体和固体中均可产生热传导，虽然产生热传导的微观机理各不相同，但一般均可用傅里叶定律来描述其宏观规律。

若将一均匀棒之两端与温度不同的两热源接触，在棒上将出现一个温度的连续分布。若在棒上沿轴向作一系列垂直于轴的横截面，因而将棒划分出一个个小单元，则相邻单元间由于存在温度差而发生热量传输。热量就是这样从高温端传到低温端的。1815 年傅里叶(J. B. J. Fourier)在热质说思想的指导下提出了傅里叶定律。在一维传热情况下，该定律认为热流(单位时间内通过的热量) Q 与温度梯度 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}z$ 及横截面积 A 成正比，即

$$Q = -\kappa \cdot \left(\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}\right) \cdot A \tag{1}$$

其中，比例系数 κ 称为热导系数(或称为热导率、导热率)，单位为 $\mathrm{W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}}$，其数值由材料性质决定。式中负号表示热流方向与温度梯度方向相反，即热量总是从温度较高处流向温度较低处。下面的表中列出了一些常见气体、液体、固体的热导率，该表取自赵凯华、罗蔚茵编的《新概念物理·热学》。

若引入热流密度 J_T(单位时间内在单位截面积上流过的热量)，则

$$J_T = -\kappa \cdot \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z} \tag{2}$$

式(1)及(2)仅适用于热量沿一维流动的情况。若系统已达到稳态，即处处温度不随时间变化，因而空间各处热流密度也不随时间变化，这时利用式(1)、(2)来计算传热十分方便。若各处温度随时间变化，情况就较为复杂，通常需借助热传导方程来求解。

傅里叶定律与电学中的欧姆定律十分相似。例如对于均匀物质的稳态传热，若把温度差 ΔT 称为“温压差”($-\Delta U_T$)，把热流 Φ 以 I_T 表示，则可把一根长为 L、截面积为 A 的均匀棒达到稳态传热时的傅里叶定律改写为

$$I_T = \kappa \frac{\Delta U_T}{L} \cdot A$$

或

$$\Delta U_T = \frac{L}{\kappa A} I_T = R_T I_T \tag{3}$$

其中

$$R_T = \frac{L}{\kappa \cdot A} = \rho_T \frac{L}{A} \tag{4}$$

称为热阻，而 $\rho_T = 1/\kappa$ 称为热阻率，可发现(3)、(4)式分别与欧姆定律及电阻定律十分类似，我们可把它们分别称为热欧姆定律与热阻定律。正像电阻有串、并联一样，棒状或板状材料的稳态传热也有类似的串、并联公式。

对于非棒状材料或非均匀固态物质的热阻、热流的计算，可借助于电学中的微分欧姆定律来建立微分热欧姆定律。若把温度梯度($\Delta T/\Delta z$)称为温度场强度 E_T，则(2)式可改写为

$$\varphi = -\kappa E_T \tag{5}$$

这就是在温度场中的微分热欧姆定律。

傅里叶(热传导)定律 Fourier law of heat conduction 见“热传导”。

热欧姆定律 thermal Ohm law 见“热传导”。

热阻定律 thermal resistance law 见“热传导”。

微分热姆欧定律 differential thermal resistance law 见“热传导”。

热(传)导系数 heat conduct coefficient 见“热传导”。在该词条的表中列出了各种材料的热导系数的数值。

气体输运现象微观分析的初级理论 the primary theory of microscopic analysis of gas transport phenomena 黏性现象是由于流体流速空间分布不均匀引起的动量输运，从而形成动量流，即黏性力；热导现象是由于空间温度分布不均匀而导致的热量输运，形成热流；扩散现象是由于空间粒子数密度不均匀而引起的粒子(或质量)的输运，形成质量流。可见输运现象是因某个宏观参量分布不均匀而引起的相

各种材料的热导率

气体(1 atm)	t/℃	κ/(W·m^{-1}·K^{-1})	金属	t/℃	κ/(W·m^{-1}·K^{-1})
空气	−74	0.018	纯金	0	311
	38	0.027	纯银	0	418
水蒸气	100	0.0245	纯铜	20	386
氦	−130	0.093	纯铝	20	204
	93	0.169	纯铁	20	72.2
氢	−123	0.098	钢(0.5C)	20	53.6
	175	0.251	非金属	t/℃	κ/(W·m^{-1}·K^{-1})
氧	−123	0.0137	沥青	20～55	0.74～0.76
	175	0.038	水泥	24	0.76
液体	t/℃	κ/(W·m^{-1}·K^{-1})	红砖	—	～0.6
液氨	20	0.521	玻璃	20	0.78
CCl_4	27	0.104	大理石	—	2.08～2.94
甘油	0	0.29	松木	30	0.112
水	0	0.561	橡木	30	0.166
	20	0.604	冰	0	2.2
	100	0.68	绝缘材料	t/℃	κ/(W·m^{-1}·K^{-1})
汞	0	8.4	石棉	51	0.166
液氮	−200	0.15	软木	32	0.043
发动机油	60	0.140	刨花	24	0.059

应某物理量 Q 的迁移,形成某种“流”$\mathscr{T}$。从微观考虑,Q 的迁移来源于分子热运动及分子间的相互作用,例如碰撞。现讨论某物理量在 z 方向有不均匀的情况,考虑在 $z=z_0$ 处有一平面,它把整个空间分为上、下两部分,下部为 A,上部为 B。考察在 Δt 时间内从 z_0 平面上某一 ΔS 面之上上下下透过的分子数。

作为初级理论,其近似之一是不考虑分子速度的大小和方向的概率分布,而仅假设所有分子均等概率地沿 $\pm x$、$\pm y$、$\pm z$ 六个方向运动,其速率均为 v。则只有沿 $+z$ 及 $-z$ 方向运动的分子可分别能从 B 进入 A,或从 A 进入 B。而在 Δt 时间内从 A 穿过 ΔS 面元进入 B 的分子数为 $\frac{1}{6}nv\Delta S\Delta t$,其中 n 为气体分子数密度,反之亦然。穿过 $z=z_0$ 平面的每个分子同时把一方的某物理量带到另一方。在黏性、热导、扩散这三个过程中此物理量 Q 分别为分子定向运动动量 mu、平均热运动能量 $E=\frac{i}{2}kT$(其中 i 为对能量均分定理做贡献的自由度数,若有振动自由度,则振动自由度数需乘以 2)、质量 m。由于系统沿 z 轴方向有不均匀,致使分子热运动出出进进 ΔS 面元所带走的上述物理量 Q 的数量不等,在 Δt 时间内沿 $+z$ 方向净流过 ΔS 的物理量为

$$\Delta Q=\left(\frac{1}{6}n\bar{v}\Delta S\Delta t\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_A-\left(\frac{1}{6}n\bar{v}\Delta S\Delta t\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_B$$

单位时间内所迁移的物理量称为“流”$\mathscr{F}$,则

$$\mathscr{F}=\frac{\Delta Q}{\Delta t}=\frac{\bar{v}}{6}\left[\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_A-\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_B\right]\Delta S \tag{1}$$

初级理论的近似之二,认为这是一种近平衡的非平衡过程,其空间不均匀性足够小,以致从 A 迁移到 B 的分子,只要发生一次碰撞就被碰撞处分子所“同化”,该分子的诸平均物理量就已经与碰撞处分子的平均物理量相等了,或者说该分子只要经历一次碰撞即“失去记忆”。在这样的假定下,从 A 无碰撞地穿过 ΔS 进入 B 中的分子就从 A 侧带来了在 $z=z_0-\bar{\lambda}$ 处的信息(其中 $\bar{\lambda}$ 为分子的平均自由程);同样,从 B 无碰撞地进入 A 中的分子就从 B 侧带来了在 $z=z_0+\bar{\lambda}$ 处的信息。这时,在(1)式中所有圆括号的下标 A 和 B 可分别以 $z=z_0-\bar{\lambda}$ 及 $z=z_0+\bar{\lambda}$ 代替,则式(1)可写为

$$\mathscr{F}=\frac{\Delta Q}{\Delta t}=\frac{\bar{v}}{6}\left[\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_{z=z_0-\bar{\lambda}}-\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)_{z=z_0+\bar{\lambda}}\right]\cdot\Delta S$$

$$\approx-\frac{\bar{v}}{6}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)\right]_{z=z_0}\cdot 2\bar{\lambda}\cdot\Delta S \tag{2}$$

$$=-\frac{1}{3}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(n\times\boxed{\text{分子携带的物理量}}\right)\right]_{z=z_0}\cdot\bar{v}\bar{\lambda}\cdot\Delta S \tag{3}$$

说明:(2)式的得到是考虑到:$z_0-\bar{\lambda}$ 处刚碰撞过的向上运动的分子恰穿过 z_0 平面发生第二次碰撞,$z_0+\bar{\lambda}$ 处向下运动分子恰穿过 z_0 平面发生第二次碰撞。这一对分子的交换导致 $z_0+\bar{\lambda}$ 处及 $z_0-\bar{\lambda}$ 处分子携带物理量的交换。由于系统处于近平衡,物理量分布的差异(也即梯度)很小,故式(1)中方括号内的因子可用对 z 的微商再乘以 $2\bar{\lambda}$ 代替,下面对黏性、热传导与扩散三种过程分别讨论:

(1)黏性过程:式(3)中的 $Q_1=P$(动量),$\mathscr{F}_1=f$(黏性力),分子携带物理量为 mu,则

$$f=\frac{\Delta P}{\Delta t}=-\frac{1}{3}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(nmu)\right]_{z=z_0}\bar{v}\bar{\lambda}\Delta S=-\frac{1}{3}\rho\bar{v}\bar{\lambda}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}\right)_{z=z_0}\Delta S \tag{4}$$

式中 $\rho=nm$ 为气体密度,将(3)式与“牛顿黏性定律”比较可得气体黏性系数

$$\eta=\frac{1}{3}\rho\bar{v}\bar{\lambda} \tag{5}$$

(2)热传导过程:式(3)中的 $Q_2=Q$(热量),$\mathscr{F}_2=\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}$(热流),分子携带物理量 $\bar{E}=\frac{i}{2}kT$

$$\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{3}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left(n\cdot\frac{i}{2}kT\right)\right]_{z=z_0}\cdot\bar{v}\bar{\lambda}\Delta S=-\frac{1}{3}n\bar{v}\bar{\lambda}\cdot\frac{i}{2}k\left(\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}\right)_{z=z_0}\Delta S \tag{6}$$

由于 $\frac{i}{2}k=C_{V,m}/N_A$($C_{V,m}$为摩尔定体热容,N_A为阿伏伽德罗常数),并与“傅里叶定律”对照,可得气体热导系数

$$\kappa=\frac{1}{3}\rho\bar{v}\bar{\lambda}C_V \tag{7}$$

式中 C_V 为定体热容。

(3)扩散过程:其中 $Q_3=M$(质量),$\mathscr{F}=\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t}$(质量流),分子携带物理量为 m,则

$$\frac{\mathrm{d}M}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{3}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}(nm)\right]_{z=z_0}\cdot\bar{v}\bar{\lambda}\cdot\Delta S$$

与菲克定律对照,可知扩散系数

$$D=\frac{1}{3}\bar{v}\bar{\lambda} \tag{8}$$

由于 $\bar{v}=\sqrt{8kT/\pi m}$;$\bar{\lambda}=1/\sqrt{2}n\sigma$($\sigma$ 为分子碰撞截面,可假设为常数),$\rho=nm$,则由(4)、(6)、(7)式可得 $\eta\propto T^{1/2}$;$\kappa\propto T^{1/2}$;$D\propto$

$T^{3/2}p^{-1}$。这说明气体黏性系数和热导系数均与压强无关,早在1860年,麦克斯韦就以实验证实了这一推论。另外,由(4)、(6)、(7)式可得 $\kappa/(c_V\eta)=1$, $D\rho/\eta=1$,而实验结果为 $\kappa/(c_V\eta)=1.3\sim2.5$, $D\rho/\eta=1.3\sim1.5$,具体数值随气体不同而异。这说明(4)、(6)、(7)式的导出仅是一种初级理论,它仅在定性的变化趋势及数量级上是准确的,定量的结果与实验有较大偏离。

气体黏性系数的导出 the derivation of viscosity coefficient of gas 见"气体输运现象微观分析的初级理论"。

气体热导系数的导出 the derivation of heat conduct coefficient of gas 见"气体输运现象微观分析的初级理论"。

气体扩散系数的导出 the derivation of diffusion coefficient of gas 见"气体输运现象微观分析的初级理论"。

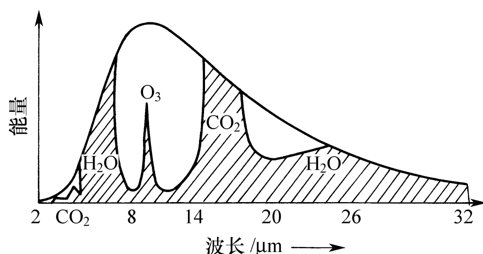
基尔霍夫定律 Kirchhoff law 一切物体在任一波长范围内的辐射本领与它在同一波长范围内的吸收本领的比值与物体特性无关,而仅是温度和波长的函数,这是基尔霍夫(G.R. Kirchhoff)于1859年从实验上得出的规律。从基尔霍夫定律可看出,任一物体在相同温度下吸收某一波长范围热辐射本领越强,则它发射同一波长范围的热辐射能力也强。它也说明了,任一物体在任一温度下发射热辐射的功率是相同温度、相同面积的黑体表面发射热辐射功率的 α 倍(α 是该物体的吸收率)。或者说,若某物体在温度 T 时的辐射出射度为 $M(T)$,在相同温度下黑体的辐射出射度为 $M^B(T)$,则利用斯特藩-玻尔兹曼定律可知

$$M(T)=\alpha M^B(T)=\alpha\sigma T^4 \qquad (1)$$

式中 σ 为斯特藩-玻尔兹曼常量。基尔霍夫定律有很多应用。例如夏天有人喜欢穿黑色的衣服,这令人费解。的确,黑色衣服吸收率高,穿黑色衣服在阳光下会感到更热;但在室内,人体温度比周围环境高,吸收率高的物体其辐射出射度也高,就易于向外散发辐射热,这时穿黑色衣服要比穿白色衣服凉爽。又如一些散热器(包括冰箱背面的冷凝器等)都涂上黑色。反之,一些保暖装置都以银白色作为"保暖色",例如热水瓶的真空夹层内壁都镀上银,从锅炉房引出的暖气管被裹了保温层后,最外面还包一层银白色的铝皮,这也是同样的原因。

辐射传热 heat transfer by radiation 任何物体表面在任何温度下均要发射热辐射能量,同时也在吸收投射到它自己表面上的热辐射能量,无论是黑体或非黑体,其反射的或吸收的热辐射能量均与 T^4 成比。若两物体表面间有温度差,则由于两表面的温度不同,发射和吸收的热辐射能量不同,致使能量从温度高的表面向温度低的表面迁移,这就是辐射传热。一般说来,辐射传热与各物体的温度、吸收率及形状都有关,情况比较复杂。

温室效应 green house effect 指地球大气层中由于有温室气体大量存在,使地球表面宛如加盖一层玻璃屋面一样,太阳光能透过这层气体,但地面向太空的热辐射却被阻挡,致使地球表面的平均温度逐步升高的现象。地球在吸收太阳辐射能的同时也向太空辐射能量。其辐射光主要为红外光。例如一般认为,地球表面的平均温度为15 ℃,15 ℃的黑体辐射分布如下图中最外面一条曲线所示,曲线极大值出现在波长 $\lambda\sim10$ μm 数量级,它在红外波段内。大气中的 CO_2、水汽、CH_4 等恰好是该波段辐射的强吸收体(图中标出了一些吸收曲线)。只需 2 m 厚的一层含 0.03% CO_2 的大气,就可将 $\lambda=15$ μm 的红外辐射全部吸收掉,而对于 18 μm 以上和 8.5 μm 以下的辐射,水汽是最主要的吸收体。可见若在大气中存在较多的 CO_2 和水汽,它将阻止地表向太空发射红外光。当然,CO_2 和水汽在吸收地表红外光的同时,也向外发射红外光,但它是向四面八方的辐射,其中有一半将重新发回地表,这样就破坏了地球的热量收支平衡,使地球表面温度逐步升高。这些气体称为温室气体。但是水汽的温室效应不会对地球表面温度升高产生较大影响,因为大气中水汽的大量存在使地面温度升高后,海水蒸发增加,致使云层增厚,云层对太阳光的反射率随之升高,又使地面温度有所降低。在温室气体中危害最大的是 CO_2 气体。例如金星覆盖有浓密的 CO_2 大气层,温



室效应使金星表面温度高达 500 ℃。据估计全世界每年向大气释放超过 55 亿吨 CO_2，其中有 15 亿吨被海洋吸收，15 亿吨被植物光合作用吸收，这样大气中每年增加超过 25 亿吨 CO_2，虽然这仅相当于大气中 CO_2 总量的 1/1000，但由于人类每年向大气排放 CO_2 量逐步增加，日积月累，大气中 CO_2 含量大量增加，将明显影响全球气候。

温室气体　green house gas　指能产生温室效应的气体，如 CO_2、水汽、CH_4 等，见"温室效应"。

大气窗　atmospheric window　地球表面的热辐射某些波段通过大气时几乎不存在大气吸收作用，这些波段相当于大气向太空打开的窗。对于大气中的水汽和 CO_2 来说，大气窗主要位于 8.5～12 μm，其他还有 2～2.5 μm，3～5 μm 以及 17～18 μm，这可从"温室效应"词条中的 15 ℃黑体辐射分布图中大致看出。注意：该图仅是 15 ℃的黑体辐射分布。

对流传热　convective heat passage　流体从某处吸收热量后流到别处向较冷的流体释放出热量的过程，它一般分自然对流、强迫对流与两相对流三种类型。

（一）自然对流传热

自然对流是指由于存在温度差而使流体内部密度不同，温度高的流体密度小，浮力使它上升；周围温度较低、密度较大的流体乘势流入补充，从而引起流体流动的过程。在自然对流过程中当然也伴随有热量的输运。在气象、地质、地理中有很多自然对流的例子。例如，因为湖海中水的热容较大，晴朗白天陆地温度升高快于湖海，热气流上升，气压相应较低，下层空气自海面流向陆地，形成海风；夜间陆地冷却快于湖海，气压相应较高，下层空气流向海面，形成陆风。

（二）强迫对流传热

强迫对流传热是指在非重力驱动下使流体作循环流动，从而进行热量传输的过程，在汽车的散热器、热泵型空调器、计算机的散热装置中，都有风机或泵驱使流体流动（或循环流动）从而加剧热量的散发或传递，这些都是强迫对流传热的实例。

（三）伴随有二相流动的传热·热管

在对流传热中，较为有效的是伴随有相变及两相流动的传热，由于液体的气化热一般都很大，故这种传热的效率较高，最典型的例子是热管。

热管是在气、液两相对流时伴随有相变传热的传热元件，它也是一种结构简单、效率高的传热元件。其构造为两端封闭的圆形金属管内壁装镶以多层金属细丝或其他毛细管（被称为管芯），管中充以适当的工作液体。当热管的一端受热而另一端被冷却时，液体在受热端吸热气化，形成的蒸气流至另一端放热凝结。凝结后的液体因管芯的毛细管作用又渗回热端，如此不断循环，从而使热量从高温端不断传到低温端。由于液体的汽化热很大，故传热效率特高，其传热效率可远高于银、铜等良导体。

自然对流　natural convection　见"对流传热"。

强迫对流　forced convection　见"对流传热"。

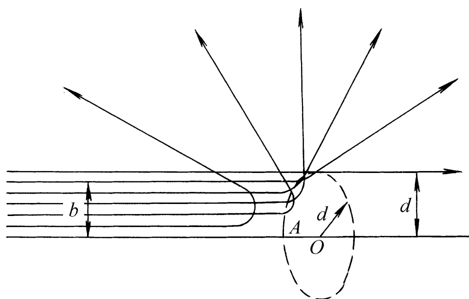
二相[对流]传热　two phases heat transfer　见"对流传热"。

热管　heat tube　见"对流传热"。

气体分子平均自由程 molecular mean free path of gas 理想气体分子每两次碰撞之间平均走过的路程。致使理想气体分子作杂乱无章的运动的原因是气体分子间在作十分频繁的碰撞,碰撞使分子不断改变运动方向与速率大小,而且这种改变完全是随机的。按照理想气体基本假定,分子在两次碰撞之间可看做匀速直线运动,也就是说,分子在运动中没有受到分子力作用,因而是自由的。我们把分子两次碰撞之间走过的路程称为自由程,而分子两次碰撞之间走过的平均路程称为平均自由程。为了说明平均自由程,必须引入分子碰撞截面与分子平均碰撞频率这两个概念。

(一)分子碰撞截面

严格说来,碰撞截面是描述两个微观粒子碰撞概率的一种物理量。其几何意义是:当两个微观粒子(或粒子系统)碰撞时,若把其中一个粒子(或粒子系统)看做是点粒子,把碰撞时的相互作用看做极短程的接触作用时,则碰撞概率正比于沿运动方向来看另一粒子(或粒子系统)等效的几何截面,这个几何截面就是碰撞截面。例如:有一束可看做点粒子的 B 分子平行射向另一静止分子 A(其质心为 O)时,若 B 分子的轨迹线如图所示,则说明 B 分子在靠近 A 分子时由于受到 A 的作用而使轨迹线发生偏折。若定义 B 分子射向 A 分子时的轨迹线与离开 A 分子时的轨迹线间的交角为偏折角,则偏折角随 B 分子与 O 点间垂直距离 b 的增大而减小。令当 b 增大到偏折角开始变为零时的数值为 d,则 d 称为分子碰撞有效直径。



由于平行射线束可分布于 O 的四周,这样就以 O 为圆心"截"出一半径为 d 的垂直于平行射线束的圆。所有射向圆内区域的视作质点的 B 分子都会发生偏折,因而都会被 A 分子碰撞。而所有射向圆外区域的视作质点的 B 分子都不会发生偏折,因而都不会被碰撞。故称该圆的面积

$$\sigma=\pi d^2 \tag{1}$$

为分子碰撞截面,也称分子散射截面。碰撞截面一般是入射粒子能量的函数。在碰撞截面中最简单的情况是刚球势。这时,不管两个同种分子相对速率多大,分子有效直径总等于刚球的直径 d。若是异种刚球分子,则碰撞截面

$$\sigma=\frac{\pi}{4}(d_1+d_2)^2 \tag{2}$$

其中 d_1、d_2 分别为这两种刚球分子的直径。

(二)分子平均碰撞频率

平衡态气体中,单位时间内一个分子平均碰撞的次数称为分子平均碰撞频率。现任取一分子 A 作为气体分子的代表,设想其他分子都被视作质点并相对静止,这时 A 分子以相对速度 v_{12} 运动(下标"12"表示两分子作相对运动时的诸物理量)。在(1)式中的碰撞截面曾假定 A 分子静止,视作质点的 B 分子相对 A 运动。现在反过来,认为所有其他分子都静止,A 分子作相对运动,显然 A 分子的碰撞截面这一性质不变。这时 A 分子的运动可被视作截面积为 σ 的一个圆盘沿圆盘中心轴方向运动,它每碰到一个视作质点的其他分子就改变一次方向,因而在空间扫出其母线呈折线的"圆柱体"。只有那些其质心落在圆柱体内的分子才会与 A 发生碰撞。单位时间内 A 分子所扫出

的"圆柱体"中的平均质点数,就是分子的平均碰撞频率 $\bar{Z}$,故

$$\bar{Z}=n\cdot\sigma\cdot\bar{v}_{12} \quad (3)$$

其中 n 是气体分子数密度,$\bar{v}_{12}$是 A 分子相对于其他分子的平均速率,而 $\pi d^2\cdot\bar{v}_{12}$就是在单位时间内所扫出的"圆柱体"的体积。可以证明,对于其平均速率分别为 $\bar{v}_1$、$\bar{v}_2$ 的 A、B 两种分子,它们间相对运动平均速率为 $\bar{v}_{12}=\sqrt{\bar{v}_1^2+\bar{v}_2^2}$,故对于同种分子,$\bar{v}_{12}=\sqrt{2}\,\bar{v}$,这时式(3)可表示为

$$\bar{Z}=\sqrt{2}\,n\sigma\bar{v} \quad (4)$$

这是同种气体分子平均碰撞频率。由于 $p=nkT$, $\bar{v}=\sqrt{8kT/\pi m}$,故

$$\bar{Z}=\frac{4\sigma p}{\sqrt{\pi mkT}} \quad (5)$$

(三)气体分子平均自由程

由于平均说来,一个平均速率为 $\bar{v}$ 的分子,它在 t 秒内所走过的路程为 $\bar{v}t$,该分子在行进过程中不断被碰撞而改变方向形成曲曲折折轨迹线。因 t 秒内受碰 $\bar{Z}t$ 次,则两次碰撞之间走过的平均路程,即平均自由程为:$\bar{\lambda}=\bar{v}t/\bar{Z}t=\bar{v}/\bar{Z}$。利用式(4)或式(5)可得

$$\bar{\lambda}=\frac{1}{\sqrt{2}\,n\sigma} \quad \text{或} \quad \bar{\lambda}=\frac{kT}{\sqrt{2}\,\sigma p} \quad (6)$$

将标准状况下的数据($p=1.013\times10^5$ Pa, $T=273$ K)及氮分子的摩尔质量 0.028 kg、氮分子有效直径 4.8×10^{-10} m 代入式(5)、(6),可知,在标准状况下,氮气分子的平均碰撞频率为 $1.2\times10^{10}\ \text{s}^{-1}$,平均自由程为 3.8×10^{-8}m,这说明气体分子相互碰撞非常频繁,即使在 1 μs时间内,也平均碰撞 10^4 次。气体趋于平衡态需借助频繁的碰撞,气体能量、动量与质量的输运也需借助碰撞,所以碰撞频率及平均自由程是决定系统微观过程的十分重要的特征量。

分子碰撞截面 molecular collision cross-section 见"气体分子平均自由程"。

气体分子平均碰撞频率 molecular collision mean frequency of gas 见"气体分子平均自由程"。

分子碰撞有效直径 effect diameter of molecular collision 见"气体分子平均自由程"。

气体分子相对运动平均速率 mean speed of gas molecular relative motion 在气体中 A 种分子与 B 种分子作相对运动的平均速率。其中 A 种分子与 B 种分子的差异可以是分子质量差异也可是气体温度差异,气体分子平均相对运动速率 $\bar{v}_{12}$应该从气体分子相对运动的麦克斯韦分布中导出,也可用近似方法导出,其结果为 $\bar{v}_{12}=\sqrt{\bar{v}_A^2+\bar{v}_B^2}$,其中 $\bar{v}_A$及 $\bar{v}_B$ 为 A、B 两种分子的平均速率。

气体分子碰撞概率分布 probability distribution of molecular collision 描述理想气体分子受到其他分子碰撞概率大小的分布函数。有两种概率分布,一种是表示分子从经受第一次碰撞后出发,继续行进 x 到 $x+\mathrm{d}x$ 距离内遭受第二次碰撞的概率分布 $P(x)\mathrm{d}x$,这也称为自由程分布。另一种是表示分子在 $t=0$ 时刻刚被碰过一次,以后它在 $t\to t+\mathrm{d}t$ 时间内遭受第二次碰撞的概率,这称为碰撞时间的概率分布 $P(t)\mathrm{d}t$。$P(x)$可如此求出:设有 N_0 个均向 x 方向运动的分子所组成的分子束,这些分子在 $t=0$ 时刻都在 $x=0$ 处刚被碰撞过一次。假如在 t 时刻、分子束运动到 x 处剩下 N 个分子,再经过 $\mathrm{d}t$ 时间,分子束运动到 $x+\mathrm{d}x$ 处又被碰撞掉$|\mathrm{d}N|$个分子(即自由程为 x 到 $x+\mathrm{d}x$ 的分子数为$|\mathrm{d}N|$,因为 $\mathrm{d}N$ 是减少的分子数,$\mathrm{d}N<0$,故要加个绝对值)。又因 $\mathrm{d}x$ 是很短的距离,可认为在 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 距离内所减少的分子数$|\mathrm{d}N|$与 x 处的分子数成正比,也与 $\mathrm{d}x$ 的大小成正比。其比例系数为 K,则 $-\mathrm{d}N=KN\mathrm{d}x$,$\mathrm{d}N/N=-K\mathrm{d}x$。对该式两边分别从 0 积分到∞。再将所得等式两边分别对 x 微分,可得

$$-\frac{\mathrm{d}N}{N_0}=Ke^{-Kx}\mathrm{d}x \quad (1)$$

既然$(-\mathrm{d}N)$表示 N_0 个分子中自由程为 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 的平均分子数,则$(-\mathrm{d}N/N_0)$是分子的自由程在 $x\sim x+\mathrm{d}x$ 范围内的概率,故式(1)是分子自由程的概率分布。导出了自由程分布后,就可求平均自由程 $\bar{\lambda}$

$$\bar{\lambda}=\int_0^{\infty}Ke^{-Kx}x\mathrm{d}x=\frac{1}{K} \quad (2)$$

将式(2)代入式(1)可得

$$-\frac{dN}{N_0}=\frac{1}{\lambda}e^{-x/\lambda}dx$$

$$=P(x)dx \qquad (3)$$

由于$-(dN/N_0)$是分子在 x 到 $x+dx$ 范围内受碰的概率,即自由程为 x 到 $x+dx$ 的概率,故式(3)中的$P(x)dx$就是气体分子自由程分布。

若令 $x=\bar{v}t$, $\lambda=\bar{v}\cdot\bar{\tau}$,其中 $\bar{\tau}$ 为两次碰撞所经历的平均时间(显然它等于平均碰撞频率的倒数 $\bar{\tau}=1/\bar{Z}$)。将它们代入到式(3)中可得

$$P(t)dt=\frac{1}{\bar{\tau}}\cdot e^{-t/\bar{\tau}}dt \qquad (4)$$

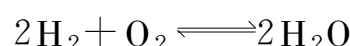
这就是分子按碰撞时间的概率分布公式。

气体分子自由程(概率)分布 probability distribution of molecular free path of gas 见“气体分子碰撞概率分布”。

气体分子碰撞时间(概率)分布 probability distribution of molecular collision time 见“气体分子碰撞概率分布”。

化学反应动力学 chemical reaction kinetics

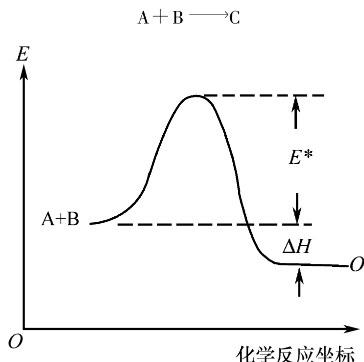
也称化学动力学,是物理化学的一个重要分支,是研究化学反应速率及反应历程的一门学科。其基本任务是(1)研究各种因素如浓度、温度、压强、催化剂、介质等对反应速率的影响,从而为人们选择反应进行的最佳条件和为控制反应的进行提供依据,使化学反应以最佳状态进行;(2)研究反应的历程。通过化学反应而达到平衡态的过程是不可逆过程,其情况都较复杂。在以前,化学动力学主要局限于实验上的观察与研究,只是在最近数十年,理论研究才有很大进展。利用分子动理论来研究化学反应的碰撞理论是其中一个重要领域。碰撞理论假定化学反应的发生是借助分子之间的非弹性碰撞来实现的。例如



$$2H_2+O_2 \rightleftharpoons 2H_2O$$

的气体化学反应,就是在两个氢分子与一个氧分子三者同时碰撞在一起时才可能发生。当然其逆反应(两个水蒸气分子碰在一起生成两个氢分子及一个氧分子)也同时存在。气体反应的速率除与参加反应气体的本身性质及它们所处的温度、压强有关外,也与这三种气体分子的相对比例有关。化学反应除要求分子间相互碰撞外,还要求参与反应的相互碰撞的分子间的相对速率应大于某一最小数值。即使是放热反应,也只有在其相对运动动能超过某一数值 E^*(称为激活能或活化能)时,反应才能发生。如下图表示

$$A+B \longrightarrow C$$



化合反应中能量变化的情况。由图可见,A+B 的能量水平线要比 C 的能量水平线高 ΔH 的能量(ΔH 称为反应热)。图中的 $\Delta H<0$,说明这是一放热反应。但是 A 和 B 碰撞并不一定能发生反应,只有 A 和 B 一起“爬过”高为 E^* 的能量“小丘”后才能进入另一能量更低的“深谷”而成为 C 物质。同样 C 需“爬过”$E^*+|\Delta H|$的更高的能量“小丘”后才能分解为 A 和 B。气体化学反应中能“爬过”小丘的能量来源于相互碰撞分子间的相对运动动能 $mv_{12}^2/2$。只有相互碰撞分子间的相对运动速率 v_{12}大于某一最小速率 $v_{\min}$,化学反应才能发生。$v_{\min}$应满足如下关系

$$E^*=\frac{1}{2}mv_{\min}^2 \qquad (1)$$

对于图示的化学反应,由于逆向反应所需能量比正向反应高$|\Delta H|$,由玻尔兹曼分布知正向反应速率大于逆向反应速率。随着时间的推移,A、B 分子逐步减少,C 分子逐步增加,在温度、压强一定时,正向反应速率逐步减小,逆向反应速率逐步增加,最后必将达到动态平衡,这时化学反应不再发生。从分析可知反应开始时增加 A、B 气体的分压有利于反应速率

的提高;升高温度或降低激活能 E^* 能更明显增加反应速率。化学反应中的催化剂就能起到降低 E^* 的作用,使化学反应可在较低的温度和压强下进行,或以更大的反应速率发生化学反应。

碰撞理论只适于简单气体的反应和溶液反应,对复杂反应,其反应速率常数的计算值一般比实测值大,这是因为它把具有一定结构和内部运动的分子作出如下的简化假设:看成是刚性圆球,把分子间复杂的相互作用看成是机械碰撞。实际上碰撞理论仅是一个半经验理论。

碰撞理论 collision theory 也称有效碰撞理论,见“化学反应动力学”。

化学动力学 chemical kinetics 即化学反应动力学,见“化学反应动力学”。

激活能 active energy 也称活化能,参见“化学反应动力学”。

活化能 active energy 即“激活能”。

催化剂 catalyst 在化学反应中能加快反应速度而其本身的数量和化学性质在反应前后保持不变的物质。催化剂只能加快化学反应速率,使之平衡提早达到而不能改变状态。它能使反应速率加快的原因,是因为它改变了反应途径,而新的途径其激活能(也称活化能,见“化学反应动力学”)较小,而激活能的减小能明显提高反应速率。常用的催化剂主要有金属、金属氧化物和无机酸等。

酶 enzyme 是一类由活细胞产生的具有催化、活性和高度专一性的特殊蛋白质。酶是生命活动中必不可少的,没有酶就没有生命。酶是参与生化反应的催化剂,它能降低生化反应的激活能(或称活化能),从而加快反应速率(见“化学反应动力学”及“催化剂”)。酶在反应过程中本身不被消耗或增生,从而能被反复使用。酶和一般催化剂的不同点是:①酶催化的一切反应都是在较温和的条件下进行,而不少化学反应的催化剂却在较高温度与压强下进行。在生物体外,酶很易失去催化活性;②酶具有高度专一性,对其作用底物有严格选择性,正像一把钥匙开一把锁一样;③酶的活性是受调节和控制的,从而保证生物机体有条不紊地新陈代谢。

真空 vacuum 对真空这一名词,在物理上与在工程技术上有完全不同的理解。在中国古代及古希腊,真空表示虚空——一无所有的空间。但到18、19世纪有所谓“以太论”,认为宇宙空间到处充满一种绝对静止的物质——以太,它是光波赖以传播的媒质。19世纪80年代的迈克尔逊-莫雷实验动摇了以太论,20世纪初狭义相对论的出现最后彻底否定了以太的存在。

(一)现代物理学的真空观

现代物理学认为,量子场是物质存在的基本形式,量子场的激发或退激即代表粒子的产生或消失。量子场系统的基态(即能量最低的状态)就是真空。这一基态形成了自然界的某种背景,一切物理测量都相对于这一背景进行。既然真空是量子场系统的基态,而量子场本身就是一种物质,所以真空并不是没有任何物质的空间,按照量子场论,在真空中各量子场可发生相互作用,因而可出现“真空涨落”(即真空中可不断地有各种虚粒子的产生、消失和相互转化),也可出现“真空凝聚”(即出现某种粒子束缚态和集体激发态的相干凝聚)此外还有所谓“真空极化”、“真空对称性自发破缺”、“真空相变”等,其情况是相当复杂的。

真空是量子场的一种特殊状态,它已成为现代物理中已由实验证实的一个基本概念。真空理论的发展,不仅为粒子物理学提供了新的概念、新的物理图像与新的思路,而且也揭露了现存理论中某些深刻的矛盾。直至今天,人类对真空的认识还只处于初级探索阶段。

(二)工程技术上理解的真空

在工程技术上所讲的真空,是指其压强低于大气压强的稀薄气体状态。气体稀薄的程度称为真空度,人们获得稀薄气体的技术就是真空技术。

(1)真空技术的历史

早在晋朝我国的炼丹家和医生葛洪即介绍了“拔火罐”法,这是将真空技术应用于医学的例子。17世纪,伽利略在研究从矿井抽水时,发现泵汲水高度不能超过10 m。伽利略曾假定吸管内存在一“真空力”,而“真空力”能拉起10 m高的水柱。不久,托里拆利(E. Torricelli)

做了著名的“托里拆利真空”实验，从而否定了“真空力”的存在，同时证明了大气压的存在。而托里拆利管就是最早的大气压强计，1648年帕斯卡(B. Pascal)在高山上测量大气压强，从而发现大气压与地面高度有关的思想。1654年德国马德堡市市长盖利克(O. von Guericke)做了著名的马德堡半球实验，从此以后，真空的存在已无人怀疑了。真空技术首次进入实用性的研究是普吕克尔(J. Plücker)和盖斯勒(H. W. Geissler)于1858年发明了真空放电管。以后1904年弗莱明(J. A. Fleming)发明了二极电子管，1907年德福雷斯特(L. de Forest)发明了三极电子管。他们的发明为20世纪无线电技术的兴起和蓬勃发展奠定了坚实基础。现代真空技术的发展已和科学技术、工业生产和日常生活紧密联系在一起，空间技术的发展又把真空技术推向一新的阶段。

(2)稀薄气体的特征

分子动理论为真空技术的发展奠定了理论基础。大家知道，当气体越来越稀薄时，气体分子的平均自由程也越来越长。但通常理解的分子平均自由程，都仅考虑分子之间碰撞，而不考虑分子与器壁碰撞，也未考虑到处于非平衡态的气体可通过分子与器壁的碰撞而发生动量和能量的传输等因素。一般情况下，分子在单位时间内所经历的平均碰撞总次数 Z_t 应是分子与分子及分子与器壁碰撞的平均次数之和，即

$$Z_t = Z_{m-m} + Z_{m-w} \tag{1}$$

这里统一以下标 $m-m$ 表示分子与分子之间碰撞的诸物理量，以下标 $m-w$ 表示分子与器壁之间碰撞的诸物理量，而以下标 t 表示这两种同类物理量之和。若在上式两边各除以平均速率 $\bar{v}$，并令 $\bar{\lambda}_{m-m} = \bar{v}/Z_{m-m}$，$\bar{\lambda}_{m-w} = \bar{v}/Z_{m-w}$，$\bar{\lambda}_t = \bar{v}/z_t$，则

$$1/\bar{\lambda}_t = 1/\lambda_{m-m} + 1/\bar{\lambda}_{m-w} \tag{2}$$

这就是分子平均自由程的更为一般的表达式。$\bar{\lambda}_{m-w}$由容器形状决定。例如，两无穷大平行板间的气体中的 $\bar{\lambda}_{m-w}$就是两平行板之间的距离，所以我们可把 $\bar{\lambda}_{m-w}$称为容器的特征尺寸 L。考虑到 $\bar{\lambda}_{m-m}$就是分子与分子间碰撞的平均自由程，则式(2)可写为

$$1/\bar{\lambda}_t = 1/\bar{\lambda} + 1/L \tag{3}$$

显然，只有当 $\bar{\lambda} \ll L$ 时才有 $\bar{\lambda}_t \approx \bar{\lambda}$ 的关系。但是随着气体压强的降低，当分子间碰撞的平均自由程 $\bar{\lambda}$ 可以与容器的特征尺寸 L 相比拟，甚至要比 L 大得多时，容器中的气体已处于稀薄或极度稀薄的状态，此时这种气体处于真空状态。

实际上，真空是相对的。充有气体的容器越大，能称为真空的气体的压强也应越低，这是因为它要求所充气体的平均自由程也相应增大。例如在微孔容器中，若孔的大小仅为 10^{-8} m，则即使微孔中气体压强为 1×10^5 Pa 仍可近似认为微孔容器处于真空中，因为在该压强下的分子平均自由程为 10^{-8} m 数量级，与微孔孔径同数量级。

(3)真空度

国际单位制中，真空度以压强单位帕(Pa)来度量，但由于历史原因，真空技术领域中至今仍习惯以托(Torr，即 mmHg)来表示真空度。真空度的覆盖范围应从 1.01×10^5 Pa(即 760 Torr)直到 $p\to0$ 的压强(目前技术上能达到的最高真空度约为 10^{-14} Torr)。由于气体的输运性质在不同的真空范围内是不同的，故必须对真空度划分一些范围。虽然气体是否处于真空状态，不仅与气体压强有关，也与容器线度有关，但对通常的气体容器来说，其划分真空的范围基本是一致的。下表列出了低真空、中真空、高真空、超高真空及极高真空的五级划分范围。

(4)稀薄气体的性质

从下页表可见，在不同真空范围内，气体的热导系数、黏度与压强的变化关系是不同的。低真空气体的输运性质与通常的理想气体是一样的，因为此时气体分子与器壁碰撞的概率很小可予忽略。但对高真空或更高真空的气体，由气体分子平均自由程公式 $\bar{\lambda} = 1/\sqrt{2}\, n\sigma$(取 σ 为 10^{-19} m^2 数量级)可知，在 10^{-7} Torr 时的平均自由程 $\bar{\lambda}$ 约为 10^4 m，已远大于容器尺寸，即使在 10^{-3} Torr 时，$\bar{\lambda}$ 约为 1 m，也比通常容器线度 L 大或大得多，由式(3)知 $1/\bar{\lambda}_t \simeq 1/L$。这时气体分子来回碰撞于容器壁之间而几乎

真空度变化的某些特征

特征	真空度				
	低	中	高	超高	极高
给定真空度的典型压强/(1.33×10^2 N·m^{-2} =1 Torr)	760～1	1～10^{-3}	10^{-3}～10^{-7}	10^{-7}～10^{-11}	10^{-11}以下
在 300 K 时的分子数密度/(m^{-3})	10^{25}～10^{22}	10^{22}～10^{19}	10^{19}～10^{15}	10^{15}～10^{11}	10^{11}以下
热传导黏度系数与压强的关系	无关	由参量 λ/L 决定	正比于压强	正比于压强	正比于压强

不与其他分子碰撞，这是高真空(及其以上的真空度)气体的主要特征。由此就决定了这类气体有与普通理想气体完全不同的输运机理。

①传热导现象　处于高真空(或更高真空度)的气体，其热传导能力正比于气体的压强，而与两隔板间距离无关。若两隔板间的温度差 ΔT 比气体平均温度 T 小得多，则单位时间内传递的热量等于单位时间内分子碰撞一侧器壁的总次数乘以一个分子在两壁间来回碰撞一次所带走的热量。由于 $\Delta T\ll T$，故可假定分子与任一壁碰撞一次后，其平均热运动动能就与该器壁温度下的分子平均动能相等，因而所传递热量正比于两壁间温度差。而单位时间内碰撞器壁总次数正比于 $n\bar{v}$，由于 $n=p/kT$，因而所传递热量正比于气体的压强。

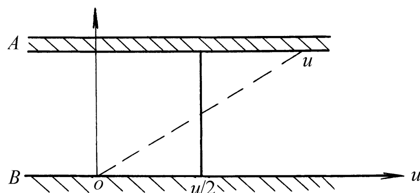
②黏性现象　若稀薄气体与容器壁之间存在相对运动，则气体与容器壁之间将存在“外摩擦”，这种摩擦取决于气体分子与运动器壁碰撞时的动量变化。气体分子与运动器壁每碰撞一次即获得了与器壁运动方向相同的平均动量，致使器壁在运动过程中不断将定向运动动量传递给周围的气体分子，因而受到黏性阻力。

与极稀薄气体中的热传导一样，由于极稀薄气体中分子的 λ_t 仅决定于 λ_{m-w}，即容器特征线度 L，因此极稀薄气体密度的减小并不影响 λ_t，仅仅使参与动量输运的分子数 $n\bar{v}/4$ 减少，所以极稀薄气体的黏度在温度一定时正比于 n，或者说正比于气体的压强。

③滑动效应与温度突变　在极稀薄气体中有一种称为滑动效应的特殊现象。考虑有两块相距为 d 的平行板 A 和 B，其中 B 板静止，A 板以速度 u 平行于板 B 匀速运动，如下图所示。由于两板之间的气体的平均自由程 $\lambda\gg d$，气体分子仅与 A、B 碰撞而不发生分子之间碰撞。当分子与 A 板相碰时它获得了 u 的定向速度，而与 B 板相碰时未获得任何定向速度。故平均说来，A、B 之间的气体分子的平均定向速度为 $u/2$。由于分子间无碰撞，也无动量的交换，因而两板与气体之间均有速度的突变。从板 B 到气体之间速度突然增加 $u/2$，从板 A 到气体之间速度突然减小 $u/2$，好像气体是并不紧贴两板而发生滑动的，这与流体流动时的情况完全不同，故称为滑动效应。

若下页图中 A、B 板均静止不动，但 B 板的温度不同，则又会发生温度突变的现象。这是因为任一气体分子与板 A 相碰后，它就具有与板 A 的温度 T_A 相对应的平均能量，而任一气体分子与板 B 相碰后，它又具有与板 B 的温度 T_B 相对应的平均能量，所以两板间气体分子的平均温度为$(T_A+T_B)/2$，这时从板 A 到气体以及从板 B 到气体之间均发生温度的突变。如，在白炽灯泡中，在玻璃壳与气体之间以及在气体与灯丝之间均发生温度的突然增加。

滑动效应及温度突变是极稀薄气体中特有的现象。



④稀薄气体中的扩散——分子流动　稀薄气体中气体分子通过容器壁的细孔向外以泻流形式的逸出就是稀薄气体中的扩散过程。气体发生泻流时,气体分子穿过细孔逸出时的运动轨迹是辐射状的直线而不是折线,这是因为气体分子在逸出小孔前后几乎不与其他分子相碰之故,这就要求小孔的直径 d 与分子平均自由程 $\bar{\lambda}$ 间应有 $\bar{\lambda} \gg d$ 的关系(这可由式(3)看出),因而要求气体是稀薄的或极稀薄的。这样的气体流动过程称为分子流动。相反,对于常压下的气体,其小孔直径 $d \gg \bar{\lambda}$,由式(2)可见,此时分子在小孔附近与器壁碰撞的概率远小于分子之间碰撞的概率,分子的运动轨迹为折线。若容器内外存在压强差,则在小孔中所发生的是成团气体的定向流动,这样的流动称为黏性流动,它不属于扩散范畴。

⑤稀薄气体的其他性质

(i)由于稀薄气体的密度非常小,因而传播声音的性能很差(或不传播声音);由于压强很低,因而物质在其中很易挥发,也不易氧化,生物也不能维持生命,其电绝缘性也会变化。(ii)由于气体压强极小,分子平均自由程很大,在电场中电子被加速路径加长,电子获得的动能很大,因而电子很易通过碰撞把气体分子电离,从而形成由电子、正离子与中性分子所组成的等离子体。地球大气的电离层、太阳等恒星大气均是由等离子体所组成。在等离子体中,电磁波的传播有很多特殊性质。(iii)在真空环境下,容易形成清洁的固体表面(这是因为气体压强越低,在固体表面吸附、黏附的杂质分子越易逸出到空间),因而使固体的表面特性(如润滑、摩擦、腐蚀等)和触媒的表面化学性质都完全不同于在大气压强下的性质。

(5)真空技术

①真空的获得:获得真空的装置主要有:(i)机械泵(如活塞泵、旋片泵,通常所见的机械泵常是旋片泵);(ii)扩散泵:用高速运动的气流,把扩散进泵体内的,与气流发生碰撞的气体分子一起带走(增压泵的原理也同于此);(iii)低温泵:利用气体分子与低温物体表面碰撞时被冷凝冻结在低温表面上,从而提高气体真空度;(iv)吸附泵:利用活性炭、分子筛等易于吸附气体的特性(在低温下它们的吸附效率更高)来提高真空度。以上几种原理在真空系统中被较普遍地使用,特别是旋片泵与扩散泵。除上述几种泵外,还有离子泵,催化泵等。

②真空的测量:人们常把测量真空度的仪器称为真空规。在不同真空度范围内应使用不同类型的真空规。在低真空范围可使用水银气压计或麦克劳规(一种利用玻意耳定律测量低气压的仪器),在中真空范围内主要使用热电偶真空计,它是利用真空度不同时其气体热导率不同的性质来测量真空度的。高真空及以上范围内真空度的测量主要用电离真空规。在电离规中,先使规中气体电离,测出被电离出的电子数量即可确定离子流强度,然后把它换算成气体的真空度。电离规可测量到 10^{-11} Torr 的压强。

(6)真空技术在工业中的应用

正由于稀薄气体有上述的特殊性质,使真空技术在科研、生产及人们日常生活中有极广泛的应用。真空技术的应用主要有以下几方面:①利用真空与地面大气之间压强差而进行流体的输运,例如离心式液体泵或鼓风机、吸尘器等;②利用气体分子数密度小、平均自由程长的特点可制造电光源、电真空器件;③由于

真空中氧含量少,工作物不易氧化可进行真空焊接、真空冶炼;④利用真空的低气压可进行某些低熔点金属(如 Mg、Li、Zn)的分馏、纯化,进行某些高沸点、高纯化学试剂的真空分馏;⑤利用真空下物质易于蒸发特点可进行真空镀膜,由此制造高真空的反射膜、透射膜、导电膜、磁性膜、半导体膜等。从真空容器中蒸发出的气体透过器壁小孔泻流逸出后,透过准直狭缝形成分子束。而分子束技术在科研及新技术中有重要应用,如分子束外延技术。另外,利用真空易于蒸发特点可进行低温脱水、真空干燥等。

现代物理学的真空观　concept of vacuum in modern physics　见“真空”之(一)

工程技术中的真空概念　concept of vacuum in engineering　见“真空”之(二)

稀薄气体的性质　property of rarefied gas　见“真空”中的(二)(4)。

分子流动　molecular flow　见“真空”中的(二)(4)④。

黏性流动　viscosity flow　见“真空”中的(二)(4)④。

滑移效应　slip effect　见“真空”中的(二)(4)③。

温度突变　temperature flash　见“真空”中的(二)(4)③

真空技术及其应用　vacuum technique and their application　见“真空”之(二)(5)及(6)。

真空获得　vacuum generation　见“真空”之(二)(5)①。

真空测量　vacuum measurement　见“真空”之(二)(5)②。

真空规　vacuum gauge　见“真空”之(二)(5)②。

真空度　vacuum degree　见“真空”之(二)(2)。

耗散结构　dissipative structure　远离平衡态的开系通过耗散过程自发地出现空间结构或时间结构、时空结构的现象。属于空间结构的如贝纳尔(Benard)对流、地幔对流等;属于时间结构的如化学振荡等。耗散结构的出现,说明系统对称性减小,因而变得更有序。这说明耗散结构是一种自发的从无序向有序的转变,很类似于从液体变为晶体的相变。因而称为非平衡相变(因为它是在远离平衡态发生的)。又由于这种有序结构是好像诸分子自发发生的宏观现象,因而称为自组织现象,这种有序结构也被称为自组织结构。

耗散结构只出现在远离平衡态的开系,这种系统呈现非线性,而非线性系统会失去稳定性,失稳的系统会对合适的涨落放大从而出现自组织结构,而耗散的存在又可使所出现的结构能稳定存在。1969 年普利高金(I. Prigogine)将远离平衡态的开系通过能量耗散过程产生和维持的时间或空间有序结构称为耗散结构。总之,耗散结构有如下特点:

①耗散结构一定发生在远离平衡态的开放系统中,而且一定出现在能量耗散的系统中,它要靠外界不断供应能量或物质才能维持。这是与平衡相变中产生的结构,例如晶体中的原胞结构完全不同,后者在封闭的孤立系统中仍能稳定存在。②只有当控制参数(例如温度差、流速等)达到一定“阈值”而产生失稳时,它才突然出现。③它具有时间或空间的结构,其对称性低于达到阈值前的状态,因而是一种非平衡相变。④耗散结构是一种非线性现象。⑤耗散结构虽是旧状态不稳定的产物,但它一旦产生,就具有相当的稳定性,不被任何小扰动所破坏。

耗散结构这一名词的产生,标志着人们对不可逆过程和对有序-无序问题的认识有了一个重大的飞跃。按照传统的观点,不可逆过程总是一种有害的东西,因为它总是耗散能量、浪费有用功。但根据耗散结构的概念,不可逆过程也可在建立有序方面起到积极作用。

自组织现象　phenomena of self organization　见“耗散结构”。

非平衡相变　non-equilibrium phase transition　见“耗散结构”。

贝纳尔对流　Bénard convection　在远离平衡态的系统所发生的热对流,它具有宏观的空间有序结构,是耗散结构的一种存在形式。法国学者贝纳尔(Bénard)于 1990 年发现如下现象:他在很大的水平放置的扁平圆形容器内充满

一层液体，其液面与容器的底分别与 T_1、T_2 温度热源接触，且 $T_2 > T_1$。在温度差 $T_2 - T_1$ 不大时，系统的传热能达到稳态，这时在同一高度的水平截面上各点的宏观特征均相同，因而具有水平方向的平移不变性。可是，一旦其温度差 $\Delta T = T_2 - T_1$ 达到并超过某一临界值 ΔT_c 时，从上面俯视扁平容器，发现液体表面出现较规则的六角形图案，每个六角形中心的液体均向上流(或向下流)，而边界处的液体均向下流(或向上流)。从纵剖面可看到流体在作一个个环流，相邻环的环流方向相反，这种规则的水花结构称为贝纳尔对流图案。1969年普利戈金(I.Prigogine)在贝纳尔对流基础上提出了耗散结构学说。

化学振荡 chemical oscillation 在化学反应中出现其反应物(或生存物)的浓度均匀一致地随时间而来回振荡的现象。这是一种在时间尺度上的有序结构，只有在远离平衡态的开系才可能产生。这也是一种耗散结构。化学反应动力学指出，在外界条件不变情况下，化学反应净速率将越来越小，最后趋于动态平衡，但是1921年雷勃发现了另一种化学反应，它在反应进程中某些成分会随时间忽高忽低地作周期性变化，这称之为化学振荡或化学钟。1958年前苏联化学家别洛索夫(Belousov)和扎鲍廷斯基(Zhabotinski)所发现的B-Z反应(取这两位化学家的姓中的第一个字母来命名)是一个典型的例子。他们将 $Ce_2(SO_4)_3$、$KBrO_3$、$CH_2(COOH)_2$、H_2SO_4 及几滴试亚铁灵试剂混合起来，再加以搅拌，则溶液的颜色会在红色与蓝色之间振荡。其颜色的振荡变化对应于3价铈离子与4价铈离子间作振荡转化，而铈离子总量恒定不变。化学振荡也可发生在生化反应中，如新陈代谢中的糖酵解反应也会出现振荡现象。

三、液体与表面
Liquid and Surface

液态 liquid state 液态与气态不同，它有一定的体积。液态又与固态不同，它有流动性，因而没有固定的形状。除液晶外，液态与非晶态固体一样均呈各向同性，这些都是液态的主要宏观特征。

(一)液态的微观结构

(1)液态的短程有序与长程无序结构

通常晶体熔解时体积将增加10%左右，可见液体分子间平均距离要比固体约大2%～3%。这说明，虽然液体中的分子也与固体中分子一样一个紧挨一个排列而成，但却不是具有严格周期性的密堆积，而是一种较为疏松的长程无序、短程有序堆积。这是液体微观结构的重要特征之一。下面我们举一个二维系统的例子予以说明。若认为每一个粒子都是大小相同的刚性球，将这些小球密堆积后的图形如图1(a)所示。这是一种规则的晶体结构。每一个粒子周围有六个最近邻粒子。但是若先在某个中心粒子周围排列五个粒子，然后由里向外，也按每一个原子周围均有五个近邻粒子那样去排列，就得到图1(b)的图形，它是比较疏松的排列，而且离开中心粒子愈远，粒子的排列也愈杂乱，粒子之间的空隙也越大。这样的系统仅在中心粒子周围数个粒子直径的线度内反映出具有排列的有序性。我们就把能反映出一定的排列规律性的粒子的群体称为一个单元。液体由很多个类似这样的单元组成，同一单元中粒子排列取向相同，相邻单元中粒子的排列取向各不相同。上述结构与非晶态固体十分相似。所以说液体具有短程有序、长程无序的特征。

物质的有序结构可以由实验来测定，其中一种常用的方法就是利用X射线衍射或中子射线衍射来测定物质的径向分布函数。理想气体的径向分布函数是一条没有任何起伏的水平线。图2是用X射线衍射方法对液体汞(曲线a)及晶体汞(曲线b)所测得的径向分布函数 $\rho(r)$。由X射线衍射可知，曲线 b 中出现的峰相应于汞晶体中原子的规则排列情况：近邻、次近邻及次次近邻……这说明晶体汞确有规则的晶体结构。而液体的曲线a在距离足够大($r > 1 \times 10^{-9}$ m)时 $\rho(r)$ 趋向一条水平直线，说明液体确实和气体一样具有长程无序性。但是在 $r < 0.9 \times 10^{-9}$ m 时曲线却有了起

伏。第一个峰出现的中心位置与晶体衍射第一个峰出现的位置差不多,以后又出现第二个峰、第三个峰。这说明在短程(几个分子大小)的范围内,液体具有与晶体相类似的有序性。

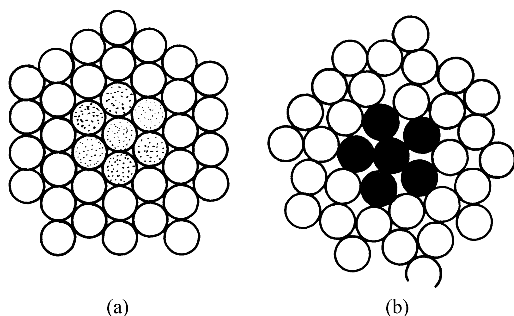


图 1

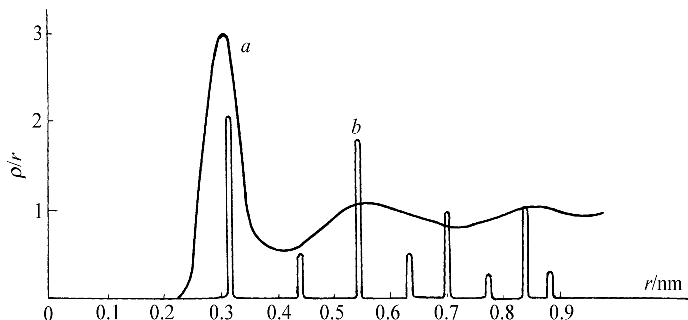


图 2

液体在小范围内有“半晶体状态”的微观结构。每个液体分子周围由最邻近的分子围绕着,形成某种规则的几何构形,但这种规则性只能维持在几个分子直径之内。即使这样的几何构形也是各不相同且变化不定的。不仅不同分子周围的几何构形会有差异,而且任何一种几何构形保持一定时间后均会被破坏。也有人把这种具有局部的“结晶结构”的单元称为类晶区。

此外,因为液体分子排列得较为松散,液体内部就有许多微小的空隙,因而在液体中可溶解或吸收少量气体分子。液体沸腾需先在液体内部形成气泡,而气泡又是由溶解在液体内部的气体分子积聚而成的。水生生物就是依靠在水中溶解的空气而得到氧气的。

(2)液体分子的热运动

实验充分说明,液体中的分子与晶体及非晶态固体中的分子和原子一样在平衡位置附近作振动。在同一单元中的液体分子的振动方向基本一致,不同单元中分子的振动方向各不相同,这一点与多晶体有些类似。但是,在液体中这种状况仅能保持一短暂的时间。以后,由于涨落等其他因素,单元会被破坏,并重新组成新的单元。液体中存在一定的分子间隙也为单元的破坏及重新组建创造了条件。虽然任一分子在各个单元中居留的时间长短不一,但在一定的温度、压强下,液体分子在单元中的平均居留时间 τ 却是相同的。一般分子在一个单元中平均振动 $10^2 \sim 10^3$ 次。对于液态金属,τ 的数量级为 10^{-10} s。

可将液体分子的热运动作如下比喻。所有分子都过着游牧生活，短时间的迁移和比较长期的定居生活相互交替。两次迁移之间所经历的平均定居时间 τ 比分子在单元中振动的周期长得多。τ 的大小与分子力及分子热运动这一对矛盾有关。分子排列得越紧密，分子间的作用力越强，分子就越不易移动，τ 也越大；温度越高，分子热运动越剧烈，τ 越小，分子也就越易迁移。在通常情况下，外力作用在液体上的时间总比平均定居时间 τ 大得多。在这段时间内，液体分子已游历了很多个单元，从而产生宏观位移，液体的流动就这样产生。若外力作用时间远小于 τ，液体不会流动。

(3)非晶态固体与液体

非晶态固体可被认为是一种没有流动性的液体，或者说是 $\tau\to\infty$ 的液体。正因为 $\tau\to\infty$，外力作用于非晶态固体的时间总是远小于 τ，所以它能呈现弹性形变。非晶态固体与液体不同点还在于非晶态固体处于亚稳态，在外界扰动合适时，它可以向更为稳定的晶态转变，而液态只有当外界温度、压强变化到满足相变条件时才可能转变为晶态。

最后需说明，液体具有长程无序、短程有序性质，它既不像气体那样分子之间相互作用较弱；也不像固体那样，分子间有强烈的相互作用，而且由于短程有序性质的不确定性和易变性，很难像固体或气体那样对液体作较严密的理论计算。有关液体的理论至今还不是十分完美的。

(二)液体的物理性质

(1)体膨胀系数

实验发现，通常在压强不变时液体的体胀系数随温度升高而略有增加，在温度不变时又随压强增大而略有减小。液体的体胀系数与下列两个因素有关：一是分子势能曲线中吸引力与排斥力的不对称性，这与产生固体热膨胀的机理类同；二是液体内部存在空隙，这种空隙使液体有类似海绵的特征，所以液体的体胀系数比固体大些。表 1 列出了一些液体的体膨胀系数 α 的数值。

表 1　液体的体膨胀系数 α

物　质	水					乙醇	乙醚	苯	水银	硫酸
t/℃	5～10	10～20	20～40	40～60	60～80	20	20	20	20	20
$\alpha\times10^{-5}$℃$^{-1}$	0.053	0.150	0.302	0.458	0.587	1.12	1.63	1.24	0.182	0.558

表 2　固体在熔解前后的定压摩尔热容量($J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}$)

物　质	钠 Na	汞 Hg	铅 Pb	锌 Zn	铝 Al	氯化氢 HCl	甲烷 CH_4
(固) $C_{p,m}$	31.82	28.05	30.14	30.14	25.71	51.37	41.87
(液) $C_{p,m}$	33.50	28.05	32.24	33.08	26.17	61.81	56.52

(2)热容

由能量均分定理可知。热容取决于分子或原子的热运动形式。按杜隆-珀替定律,固体的摩尔定容热容为 $3R$,说明每个固体分子都在作三维振动。实验又表明,在熔解的前后,固体与液体的热容相差甚小(见表2),说明液体分子也是在平衡位置附近作振动。另外,虽然固体的体胀系数很小,因而可认为固体的 $C_{p,m}\approx C_{V,m}$,但液体的体胀系数比固体大得多,所以液体的 $C_{p,m}-C_{V,m}$ 要比固体大。例如对于20K的液氢,其 $C_{p,m}=18.42\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$, $C_{V,m}=11.72\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$;在298K时的水,其 $C_{p,m}=75.41\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$, $C_{V,m}=74.64\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}}$。实验还证实,液体的热容与温度有关。例如水的热容在313 K附近有一明显的极小值。

(3)黏性

与气体不同,液体的黏性较气体大,且随温度的升高而降低。这是因为液体分子受到它所在单元中其他分子作用力的束缚,不可能在相邻两层流体间自由运动而产生动量输运之故。液体的黏性与单元对分子的束缚力直接有关。单元对分子束缚的强弱体现在单元中分子所在势阱的深度 E_d 的大小上,而 E_d 又决定了分子在单元中的平均定居时间 τ。因为 τ 越长,流体的流动性就越小,而流动性小的流体的黏度大。可估计到,η 应该与 τ 有类似的变化关系。实验证实,液体的黏度

$$\eta=\eta_0\cdot\exp(E_d/kT)$$

其中 η_0 是某一常数。

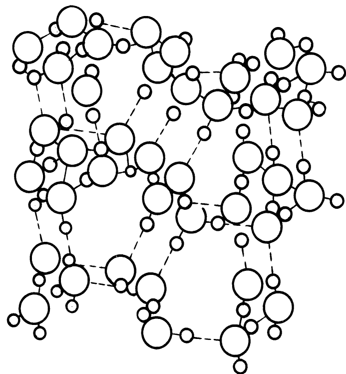
液体的微观结构 microscopic structure of liquids 见“液态”。

液体的物理性质 physical property of liquids 见“液态”。

水的结构与物理性质 structure and physical property of water 水是人们生活中最常见也是最重要的物质之一。水是最重要的溶剂,因而水是生物体中最主要的组成部分,水是生命之源。水也具有一些与其他液体不同的物理和化学性质,有关水的各种问题,值得大家去关心。

(一)水的结构

在气态时,单个水分子的结构已准确测定。其中O—H键的键长为 95.72×10^{-12} m,两个O—H键之间夹角为104.52°。但在液态时(水)以及固态时(冰)或水合物晶体中,水分子的结构与气态完全不同。水是极性分子,它的正电性一端(H)常和负离子或其他分子中的负电性结合形成氢键(例如O—H…O、O—H…N、O—H…Cl等,其中的虚线线段表示氢键,实线段表示共价键)。负电性的一端(O)常和正离子或其他分子中的正电性一端结合成氢键(例如O…H—O、O…H—N),或和 M^{n+} 配位,形成水合离子。日常生活中见到的冰、霜、雪均呈四面体的结构形式,如图所示。其中每个



冰的氢键结构

大球表示氧原子,小球表示氢原子,虚线表示氢键

水分子与另外四个水分子搭成一个正四面体的结构。每个氧原子周围有四个氢原子,其中有两个氢原子离得较近,它们与氧原子以共价键结合,另外两个氢原子离得稍远,它们以氢键相结合。这四个氢原子中的每一个又分别联结另外一个氧原子。其中两个氢原子以共价键与氧原子结合,而另外两个氢原子以氢键与氧原子结合。这四个氧原子正好位于正面体的四个顶点上。这是一种较为疏松的结构,故冰的密度较小。至于水在液态时的结构。已研究得很多。水中存在相当多的O—H…O氢键,也可存在类似于冰那样的四面体结构,

这些均已被实验所证实。但水的真实结构图像尚不十分清楚,因而目前对磁化水、π 水等的结构、作用和机理也都有待研究。

(二)水的反常膨胀

人们都熟知水有反常膨胀现象。冰熔解时体积反而变小,水的密度不是在 0℃,而是在 4℃时最大。这是因为冰和水中都有以氢键相结合的部分。当冰熔解为 0℃的水时,热运动能破坏了部分氢键的结构,部分水分子填补了原来的四面体结构中的空隙,故 0℃的水要比 0℃的冰的密度大。水的温度从 0℃逐渐升高时,有两种使其密度改变的因素:一是由于继续有部分氢键遭破坏,空隙继续被水分子填入而使密度增加;另一种是正常液体的热膨胀现象。在 4℃以下第一种因素占优势,故在 0~4℃间,其密度随温度升高而增加,这就是水的反常膨胀现象。4℃以上第二种因素占优势,发生正常膨胀。正因为冰的密度比水小,而水在 4℃时密度又最大,因而江河湖海一般不致冻结到底,使水生生物得以越冬。除冰以外,铋、锑也有熔解时的反常膨胀。

(三)水的其他物理性质

(1)水有很高的摩尔热容。按能量均分定理,水蒸气(有 6 个自由度)的摩尔定体热容为 $3R$,故其比热容 $c_V=3\times\frac{8.31}{0.018}\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}=1.385\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$。实验测得水汽在 0℃时的比热容为 $1.396\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$,说明符合较好。按杜隆-珀替定律,冰的定体摩尔热容也是 $3R$,由于固体的 $C_p\approx C_V$,故其定压比热容 $C_p\approx C_V=1.385\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$,实验测得在 0℃的冰的定压比热容为 $1.911\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$,虽然有明显差别,但数量级还是符合较好的。实验测出水在 0℃、25℃、100℃的定压比热容分别为 $4.217\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$、$4.168\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$、$4.196\,\mathrm{kJ\cdot kg^{-1}}$,实验值与能均分定理的结果相差较大,而且液态水的热容不随温度升高而单调变化(先降低后升高)。这一现象发生的主要原因仍然是氢键的作用。水在升温时不仅增加热运动能量,还要不断地破坏氢键。

(2)冰的熔解热较低,但升华热又较高。前者是因为冰熔解时只有 15% 的氢键被破坏;后者是因为冰中的水分子是按四面体结合的,在每一个共价键的另一侧又附加上一个氢键。升华时破坏的键能多。

(3)水的汽化热很高,甚至比任何氢化物都要高得多。这是因为当温度升高到沸点时,水中仍有相当数量的氢键。

(4)水的黏度和表面张力系数均较大,这也是因为水中存在氢键,使分子之间作用力加强的缘故。

(5)水是应用最广的极性溶剂。水是极性分子,所以水有很高的介电常数。水又可形成氢键,因而水对盐类有极高的溶解能力。水可溶解如氯化钠、硫酸那样的离子化合物,以及如氨、糖、氯化氢等许多有极性的共价键分子。在硫酸分子溶解于水的过程中,由于水分子的正负极分别与 SO_4^{2-} 离子及与 H^+ 离子之间的作用力均大于硫酸分子内部离子间作用力,所以当硫酸分子被加入水中时,具有极性的水分子会将硫酸分子拆开,使每个离子均被水分子所包围。水分子的负极性与 H^+ 离子结合,而水分子的正极性与 SO_4^{2-} 离子结合。在这种溶解过程中常伴有能量的释放和吸收,所释放的能量称为溶解热。例如未溶解前一个硫酸分子的能量要比溶解后硫酸离子的总能量高 0.8 eV,所以硫酸溶解于水时要发热。像硫酸那样溶解于水时会产生离子的物质称为电解质。极性共价键分子溶于水时并不产生离子,不过它的正极性端也面对水分子的负极性端,它的负极性端也面对水分子的正极性端,这样同样能组成溶液。

(6)水对红外光的吸收能力特强。实验发现,纯水对波长在 $(1.7\sim2.1)\times10^{-5}$ m 范围内的红外光其吸收能力明显强于水对其他波长光的吸收,且明显强于一般的其他分子对该红外光的吸收。这一性质有很多实际应用。如工业上的低温高效干燥器的原理是,从红外辐射器辐射出来的红外光,照射在含水物体上,大部分为水所吸收,使水分子很快被蒸发掉,而整体温度并不高。在医疗上的红外治疗,是利用肌体中的水及其他蛋白质、糖和核酸等物质中的 O—H、N—H 键很容易吸收红外光,从而增加活动机能。

水的其他物理性质为:水在20℃时的等温压缩系数为4.5×10^{-10} m·N^{-1};在20℃时的黏度为1.01×10^{-3} N·s·m^{-2};水的临界温度为647.30K,临界压强为220.43×10^{5} N·m^{-2},临界摩尔体积为56.25×10^{-5} m^{3}·mol^{-1};水在20℃的体胀系数为0.207×10^{-3} K^{-1}。

水是生命之源 water is the source of life 空气、阳光和水是生命存在的三个必要条件。而生命依赖负熵为生,生物在生存期间必须不断地从环境吸取负熵从而达到使自身熵的减少。或者说生命体必须从环境中吸取空气、水和其他有序物质,同时向外界排泄无序物质并散发热量,而这整个过程是排熵过程。淡水在各个层次上对排熵起着关键性作用:把排泄物的废热(熵)从细胞输送给排泄器官而排出到外界,都必须以水作为载体。虽然地球的总水量为1.4×10^{21} kg,但是淡水仅是地球总水量的2.7%,其余97.3均为咸水,而且淡水的极大部分在南极洲(在两极、冰帽和高山上的淡水占77.2%,土壤水、地下水占22.4%,而湖泊、沼泽、河流的水仅占0.36%,大气水占0.04%)。随着经济的飞速发展,水资源紧缺已成为影响全世界特别是我国可持续发展的一个十分突出的问题。虽然我国水资源总量为2.8×10^{15} kg,但人均水资源占有量远低于世界平均水平,这已引起有关方面及人们越来越多的关注。

界面与表面 interface and surface 通常把固体与其他物质接触的边界层称为界面,因而有固-气、固-真空、固-液、固-固界面之分。人们把固体与气体(或与真空)的接触面称为固体表面。界面不是几何学上抽象的平面或曲面,而是具有一定厚度(一般仅几个或十几个原子的线度)的,在两个均匀相之间的不均匀的过渡层,它取决于这两个均匀相之间的热力学平衡条件。界面层的物理和化学性质与界面两侧均匀相的性质相比有显著的特殊性。在界面层中,原(离)子、分子的组分比例、排列方式、原(离)子间电子转换的数量不同于体内,因而其化学键的特征等都同体内不同,以适应界面层中的电势分布。所以,在界面层中电子的状态、原子振动模式及它们同电磁场相互作用的模式等均不同于体内。其杂质和缺陷在界面层中的分布和聚合状况也与体内不同。它可发生成分的偏析、结构的变化、电子态的改变,也可形成吸附层或表面化合物等。表面的物理状态对固体的许多物理、化学性质有很大的影响,如金属和合金的腐蚀、断裂和氧化、磨损等;又如催化剂表面上进行的化学反应速率就和表面上的吸附、凝聚等密切有关。再如半导体表面的研究一直是器件工艺和物理研究中的重要课题,它促进一些新表面器件的发展,对电子技术、计算机技术的发展产生新的影响。表面物理学的研究成果也对冶金学、材料科学、固体物理、石油化工、半导体和微电子学、真空技术等的发展起着重要的影响。

液体的表面现象 surface phenomena of liquids 发生在液体与气体或液体与不相互溶解的另一种液体的接触界面(这种界面称为自由表面)上的现象,其中最为简单的是液体与气体接触的表面所发生的现象。

(一)表面张力与表面张力系数

很多现象表明,液体表面有尽量收缩表面积的趋势,使液体像张紧的膜一样,可见在液体表面存在一种表面张力。表面张力是作用于液体表面的切面上,使液体表面具有收缩趋势的拉力。若在液体表面上任意画一条假想的其长度为l的直线段,则在直线段两侧垂直于该线段上,均作用有与液面相切的其数值相等方向相反的表面张力f。定义单位长度上的表面张力为表面张力系数σ,则

$$f=\sigma l \tag{1}$$

σ的单位为N·m^{-1}。

(二)表面能与表面张力系数

从微观上看,表面张力是由于液体表面的过渡区域(称为表面层)内分子力作用的结果。表面层厚度大致等于分子引力的有效作用距离R_0,其数量级约为10^{-9}m,即二、三个分子直径的大小。设分子互作用势能是球对称的,我们以任一分子为中心画一以R_0为半径的分子作用球,在液体内部,分子作用球内其他分子对该分子的作用力是相互抵消的,但在液体表面层内却并非如此。若液体与它的蒸气相

接触，其表面层内分子作用球中或多或少总有一部分是密度很低的气体，使表面层内任一分子所受分子力不平衡，其合力是垂直于液体表面并指向液体内部的。在这种分子力的合力的作用下，液体有尽量缩小它的表面积的趋势，因而使液体表面像拉紧的膜一样。表面张力就是这样产生的。当外力 F 在等温条件下扩大肥皂膜的表面积时，一部分液体内部的分子要上升到表面层中，而进入表面层的每一个分子都需克服其方向指向液体内部的分子力的合力作功。扩大 dA 表面积所作的功为 $dW=\sigma dA$。既然分子力是一种保守力，外力克服表面层中分子力的合力所作的功便等于表面层中的分子引力势能的增加，我们把这种分子引力势能称为表面自由能 $F_{表}$（有时也称为表面能），故

$$dW=dF_{表}=\sigma dA \tag{2}$$

由式(2)可知，表面张力系数 σ 就等于在等温条件下增加单位表面积液体表面所增加的表面自由能。它的单位也可写成 $J\cdot m^{-2}$。

（三）表面张力系数与温度的关系

$d\sigma/dT<0$. 例如纯水的表面张力系数可表示为

$$\sigma=\sigma_0\left(1-\frac{t}{t'}\right)^n \tag{3}$$

其中 σ_0 是 $t=0$℃时的表面张力系数；t' 是比水的临界温度 t_C 低几度的摄氏温度，它是一常数；n 也是一常数，其数值在 1 与 2 之间。当 $t'\leqslant t\leqslant t_C$ 时，$\sigma=0$，这是因为液体处于临界点时，其液相与与之平衡的气相之间的密度差异已趋于零之故。在 0℃$<t<t'$ 时的 σ 随温度 t 增大而减小的物理解释是因为随着温度的升高，气相中蒸气的密度增加，致使液体表面层中分子的分子作用球内气相与液相的分子数密度差异减少，因而该分子受到的分子力的合力（其方向指向液体内部）减少，故表面张力系数减小。下表列出了一些液体的表面张力系数。

与空气接触的液体的表面张力系数

液体	t/℃	$\sigma/(10^{-3}N\cdot m^{-1})$	液体	t/℃	$\sigma/(10^{-3}N\cdot m^{-1})$
水	0	75.6	O_2	−193	15.7
	20	72.8	水银	20	465
	60	66.2	肥皂溶液	20	25.0
	100	58.9	苯	20	28.9
CCl_4	20	26.8	乙醇	20	22.3

（四）弯曲液面附加压强

当液面为曲面（例如球面）时，从液面中隔离出某一曲面（例如某一球冠），曲面边界线上受到曲面外侧的表面张力不在同一平面上，其合力的“水平”分力可相互抵消，但“竖直”分力的合力不为零，这一合力被除以曲面的“水平”投影面积就是表面为曲面的表面张力所产生的附加压强 $p_{附}$。可以证明，对于球面内（如液滴内部或液体中气泡内）的压强 $p_{内}$ 要比球面外的压强 $p_{外}$ 大如下数值

$$p_{附}=p_{内}-p_{外}=\frac{2\sigma}{R} \tag{4}$$

其中 R 为球面的半径。显然，肥皂泡内要比肥皂泡外大 $4\sigma/R$ 的附加压强。

若曲面不是球面，则可在曲面上任取一点 O，过 O 点作相互垂直的正截面 P_1 与 P_2，截面与弯曲液面相交截得 A_1B_1 及 A_2B_2，若 A_1B_1 与 A_2B_2 的曲率中心分别为 C_1 与 C_2，且 C_1 与 C_2 同在凸曲面内侧，其曲率半径分别为 R_1 与 R_2，则这样的弯曲液面所产生的附加压强为

$$p_{附}=\sigma\left(\frac{1}{R_1}+\frac{1}{R_2}\right) \qquad (5)$$

这称为拉普拉斯公式。我们定义曲率中心在凸曲面内侧的曲率半径为正，否则为负。

拉普拉斯公式不仅适于弯曲液面，也适于弹性曲面（如橡皮曲面膜、血管等）所产生的附加压强。如半径为 R 的弹性管腔及血管，若单位长度的膜张力为 T，则附加压强为 $p_{附}=T/R$ 在医学上这一公式可用作毛细血管跨膜压的分析。

（五）润湿与不润湿（也称浸润与不浸润）

（1）润湿现象与不润湿现象　水能润湿（或称浸润）清洁的玻璃但不能润湿涂有油脂的玻璃。水不能润湿荷花叶，因而小水滴在荷叶上形成晶莹的球形水珠。在玻璃上的小水银滴也呈球形，说明水银不能润湿玻璃。自然界中存在很多与此类似的液体润湿（或不润湿）与它接触的固体表面的现象。润湿与不润湿现象是在液体、固体及气体这三者相互接触的表面上所发生的特殊现象。

（2）对润湿与不润湿的定性解释　类似于液体与气体接触表面，在液体与固体接触面的液体一侧也存在一介面层，习惯称为附着层。在附着层中液体分子平均能量既可大于液体内部分子，也可小于液体内部分子。所高出的能量称正表面能，所减少的能量称负表面能，这决定于液体分子之间及液体分子与邻近的固体分子之间相互作用强弱的情况。若固体分子与液体分子间吸引力的作用半径为 l，而液体分子之间的吸引力作用半径为 R_0，则不妨设附着层的厚度是 l 与 R_0 中的较大者。现考虑附着层中某一分子 A，它的分子作用球如图 1 所示，作用球的一部分在液体中，另一部分在固体中。由于 A 分子作用球内的液体分子的空间分布不是球对称的，球内液体分子对 A 分子吸引力的合力不为零。若把这一合力称为内聚力。则内聚力的方向垂直于液体与固体的接触表面而指向液体内部。若把固体分子对 A 分子的吸引力的合力称为附着力。则附着力的方向是垂直于接触表面指向液体外部。虽然附着层中的分子离开固体与液体接触面的距离可各不相同，使所受到的内聚力与附着力也不同，但对于附着层内的分子说来，总存在一个平均附着力 $f_{附}$ 及平均内聚力 $f_{内}$。若 $f_{附}<f_{内}$，附着层内分子所受到的液体分子及固体分子的分子力的总的合力 f 的方向指向液体内部。这时与液体表面层内的分子一样，附着层内分子的引力势能要比在液体内部分子的引力势能大。显然，这时的表面能是正的。相反，若 $f_{附}>f_{内}$，附着层内分子受到的总的合力的方向指向固体内部，说明附着层内分子的引力势能比液体内部分子的引力势能要小，则附着层内分子的表面能是负的。我们知道，在外界条件一定的情况下，系统的总能量最小的状态才是最稳定的。若 $f_{附}>f_{内}$，液体内部分子尽量向附着层内跑，但这样又将扩大气体与液体接触的自由表面积，增加气液接触表面的表面能。总能量最小的表面形状是如图 1(a)所示的弯月面向上的图形，这就是润湿现象。与此相反，若 $f_{附}<f_{内}$，就有尽量减少附着层内分子的趋势，而附着层的减小同样要扩大气液的接触表面，最稳定的状态是如图 1(b)所示的弯月面向下的表面形状，这就是不润湿现象。

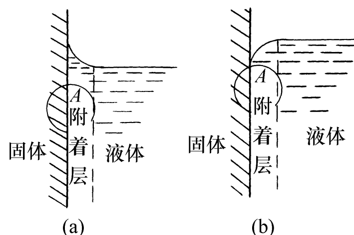


图 1

（3）接触角　润湿、不润湿只能说明弯月面向上还是向下，不能表示弯向上或弯向下的程度。为了能判别润湿与不润湿的程度，引入液体自由表面与固体接触表面间的接触角 θ 这一物理量。它是这样定义的：在固、液、气三者共同相互接触点处分别作液体表面的切线与固体表面的切线（其切线指向固-液接触面这一侧），这两切线通过液体内部所成的角度 θ 就是接触角。显然，$0\leqslant\theta<90°$ 为润湿的情形，$90°<\theta\leqslant180°$ 为不润湿的情形。习惯把 $\theta=0°$

时的液面称为完全润湿，$\theta = 180°$ 的液面称为完全不润湿。例如，浮在液面上的完全不润湿的均质立方体木块所受的表面张力的方向是竖直向上的，这时物体的重力被浮力与物体所受的表面张力所平衡。若液体能完全润湿木块，重力与表面张力的合力方向向下，这时重力与表面张力被浮力所平衡，木块浸在液体中的体积要相应增加。

（六）毛细现象

内径细小的管子称为毛细管。把毛细玻璃管插入可润湿的水中，可看到管内水面会升高，且毛细管内径越小，水面升得越高；相反，把毛细玻璃管插入不可润湿的水银中，毛细管中水银面就要降低，内径越小，水银面也降得越低，这类现象就称为毛细现象。毛细现象是由毛细管中弯曲液面的附加压强引起的。若将内径较大的玻璃管插入可以润湿的水中，虽然管内的水面在接近管壁处有些隆起，但管内的水面大部分是平的，不会形成明显的曲面，不会产生附加压强，故管内外液面处于相同高度。但是，若插入水中的是毛细圆管，则管内液面便形成半径为 R 的向上凹的曲面，如图所示。附加压强使图中弯月面下面的 A 处压强比弯月面上面的 D 点压强低 $\frac{2\sigma}{R}$，而 D、C、B 处的压强都等于大气压强 p_0，所以弯曲液面要升高，一直升到其高度 h 满足

$$p_0 - p_A = \frac{2\sigma}{R} = \rho g h \qquad (6)$$

的关系为止，其中 ρ 为液体的密度。由图 2 可见，毛细管半径 r，液面曲率半径 R 及接触角 θ

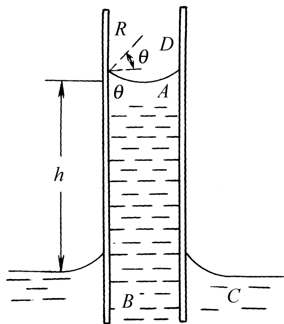


图 2

间有关系 $R = r/\cos\theta$，将它代入式(6)，可得

$$h = \frac{2\sigma\cos\theta}{\rho g r} \qquad (7)$$

说明毛细液面上升高度与毛细管半径成反比，也与液体润湿与不润湿的程度有关。若液体是不润湿的，这时 $90° < \theta \leqslant 180°$，$\cos\theta < 0$，$h < 0$，毛细管中液面反而要降低。

表面张力 surface tension 见“液体的表面现象”之(一)

表面张力系数 coefficient of surface tension 见“液体的表面现象”之(一)及(二)、(四)。

液体的表面能 surface energy of liquid 见“液体的表面现象”之(二)、(三)。

负表面[能] negative surface energy 见“液体的表面现象”之(五)(2)。

弯曲液面附加压强 supplementary pressure of meniscoid surface 见“液体的表面现象”之(五)。

拉普拉斯[附加压强]公式 Laplace's formula of supplementary pressure 见“液体的表面现象”之(五)。

弹性曲面附加压强 supplementary pressure of meniscoid elastic surface 见“液体的表面现象”之(五)。

润湿与不润湿 wetting and not-wetting 见“液体的表面现象”之(六)。

浸润与不浸润 wetting and not-wetting 即“润湿与不润湿”，见“液体表面现象”之(六)。

内聚力 cohesive force 见“液体的表面现象”(五)之(2)。

附着力 adhesive force 见“液体的表面现象”(五)之(2)。

接触角 contact angle 见“液体的表面现象”之(六)。

润湿角 wetting angle 即“接触角”。

毛细现象 capillary phenomena 见“液体的表面现象”之(七)。

表面活性剂 surface activator 能使液体的表面张力系数显著变小的物质，例如肥皂、洗衣粉等。实验发现，溶液的表面张力系数随溶质的浓度而变。若一种物质甲能显著降低另一种物质乙的表面张力，就说甲对乙具有表面

活性。因为水是最重要的溶剂。若不另加说明,表面活性都是对水而言。水溶液中的溶质分子有疏水基团与亲水基团之分。疏水基团又称非极性基团(如碳氢链)。疏水基团和水不能形成氢键,相互作用力也较弱。亲水基团又称极性基团,如烃基,它们和水能生成氢键,相互作用力较强。碳氢链和水分子间并不存在排斥作用,只是它们间的吸引力小于水-水和极性基团-水间的吸引力,故碳氢链表现出逃离水面自相缔合的趋势。疏水基团的相互作用是由于亲水基团有聚集在一起的倾向,从而反映出疏水基团也会聚合在一起。表面活性剂均是一些有机化学试剂。其分子结构是线型分子,且它同时兼有亲水性与疏水性。它一端带有极性基团,能和水形成氢键,因而亲水;而另一端为非极性烃基,疏水。作为表面活性剂,每个烃基应含有 8 个碳原子以上的链,才具有表面活性所具有的优良性能。表面活性剂因为含有亲水基团,具有亲水性,利用亲水性可制作洗涤剂和消泡剂。表面活性剂因为含有疏水基而具有疏水性。疏水基是亲油的。根据“相似、相容”原理,疏水基和油的结构越相近,两者亲和性越好。由于表面活性剂分子一端为疏水基(非极性端),另一端为亲水基(极性端),它在水溶液表面(或界面)呈定向排列,其极性端进入水相,非极性端进入空气相或油相,因而排列有序。由于排列在液体表面的极性头的亲水性,因而能明显降低水的表面张力系数,改变了表面的润湿性能,并能产生乳化、破乳、起泡、消泡、分散、絮凝等方面的作用。

亲水性 hydrophilic interaction 见“表面活性剂”。

疏水性 hydrophobic interaction 见“表面活性剂”。

固体表面吸附 adsorption of solid surface

(1)固体吸附　在固体内部,形成点阵的每个粒子受到周围粒子的作用力而相互抵消,而位于固体表面层的粒子,仅受到固体表面层内部粒子的吸引作用,固体外部又几乎没有粒子,因而表面层中分子的合力不为零,合力方向垂直于固体表面指向固体内部,于是在固体表面层附近形成一个表面势场。当环境中的异种气体分子运动到足够靠近固体表面时,在这势场作用下被吸附到表面上,同时减少了固体的表面势能。这种现象就称为固体的表面吸附。在吸附过程中,固体所减少的表面能以热量方式不断向外释放,所释放的热量称为吸附热。被固体表面吸附的气体分子将参与固体的热运动(振动),那些热运动动能足够大的吸附质分子,可克服吸附剂分子的吸引力而重新回到气体中。通常在与气体接触的固体表面上总保留着一些被吸附的气体分子。温度越低,被吸附的分子也越多。

吸附作用分为两类:一种是物理吸附。在物理吸附中,吸附质分子与吸附剂分子之间的相互作用力是范德瓦尔斯力,所以物理吸附能保证吸附质分子的完整性不被破坏。例如活性炭可吸附各种气体分子,也可吸附溶液中的某些溶质分子等。物理吸附不稳定,它易于退吸附,对吸附物质无选择性,在一定温度下,任何固体表面都可吸附气体。另一种是化学吸附。在化学吸附中,吸附质分子与吸附剂分子之间形成表面化学键,使被吸附的气体分子内部结构发生变化,这类同于气体分子与固体表面层分子发生的化学反应。例如镍吸附氢时,氢气分子分解为氢原子后,再被吸附到镍的表面上。在有的化学吸附中常伴随有吸附质分子中的价电子的重新分配。化学吸附较稳定,不易退吸附,有一定的选择性。一般很难判断所产生的吸附是物理吸附还是化学吸附,因为这两种吸附常同时出现。

(2)吸附等温线　一般说来,在吸附质气体的临界温度以上时,在非反应的固体表面上所吸附的常是单层的吸附分子。只有在临界温度以下才可能在固体表面上吸附多层分子。对于单层吸附,可将单位面积固体表面所覆盖的吸附分子数定义为覆盖率 θ。在等温条件下,覆盖率 θ 随吸附气体的压强 p 变化的关系称为吸附等温线。利用统计物理可证明,单分子层的吸附等温方程为

$$\theta=\frac{bp}{1+bp} \tag{1}$$

其中 b 是一与温度有关的常数。θ 与 p 之间的

关系曲线称为朗缪尔吸附等温线。当压强增大到一定程度,整个固体表面已差不多覆盖满一层吸附分子时,θ已基本不变,吸附已接近饱和。另外,温度越低,也越有利于吸附,因为这时已被吸附的分子更不容易挣脱吸附剂分子的吸引力而逃逸到气体中。所以在 p 一定时,T 越小,θ 越大。因为式(1)中的 b 是 T 的函数,且 b 随 T 的增大而减小,所以 θ 也随 T 的增大而减小。

(3)固体的比表面积　显然,固体表面的吸附能力不仅与被吸附气体的压强、温度有关,也与固体表面积的大小有关。通常我们所接触的是大块固体,虽然固体表面总是凹凸不平的,但单位质量固体所具有的表面积(称为比表面积)仍很小。为了扩大比表面积,常把吸附剂做成多孔性的物质。常用的吸附剂如分子筛、活性炭、硅胶等都是多孔性物质。

(4)退吸附与吸附能　当吸附剂所吸附的气体分子达到饱和或接近饱和时,需进行退吸附处理,以便下次再投入使用。与吸附相反,退吸附应在加热、抽真空条件下进行。因为吸附分子热运动越剧烈,越有利于挣脱吸附剂对它作用的分子力而逸出,而抽真空不仅可把已退吸附的分子及时抽走,使之不致再次碰到固体表面而重新被吸附,而且也利于被吸附分子的逸出。因为在退吸附过程中需克服分子力作功,所以在退吸附时固体表面要吸收能量。我们把平均每个分子退吸附所需吸收的能量称为吸附能,它表示平均说来一个吸附分子比一个气态自由粒子所降低的能量。物理吸附的吸附热与升华热的数量级一般相同。简单分子的物理吸附热大约在 4～20 $kJ\cdot mol^{-1}$范围内。复杂分子的物理吸附热大约在 40～80 $kJ\cdot mol^{-1}$范围内。化学吸附热可与化学反应热相比拟,一般在 40～400 $kJ\cdot mol^{-1}$范围内。

吸附在实验及生产技术中有很多重要应用。抽真空过程中,真容容器表面吸附气体的慢性释放是影响抽真空的速度及真空度提高的重要因素之一。提高真空部件表面的光洁度及对表面进行清洁处理可减少所吸附的气体及表面杂质。相反,钛泵是利用吸附作用来获得超高真空的设备。若在真空容器中加入一些被液氮冷却的活性炭,也能明显提高真空度。吸附在防毒、脱色、脱臭以及对混合物进行分离、提纯及污水处理、净化空气中都有重要的应用。它对催化剂的研究起重大作用。

吸附　adsorption　见“固体表面吸附”。

吸附热　adsorption heat　见“固体表面吸附”。

吸附能　adsorption energy　见“固体表面吸附”。

[朗缪尔]吸附等温线　Langmuir's adsorption isotherm　见“固体表面吸附”。

物理吸附　physical adsorption　见“固体表面吸附”。

化学吸附　chemical adsorption　见“固体表面吸附”。

退吸附　desorption　见“固体表面吸附”。

比表面积　ratio of surface area　见“固体表面吸附”。

半透膜的功能　function of semipermeable diaphragm　膜是向二维伸展的结构体,在膜的两侧均可存在固体与气体或固体与液体间的界面。膜的基本功能是它能从物质群中有选择地透过或输送特定的物质(如分子、离子、电子、光子等),因而把膜视为一种基础功能材料。膜的主要功能有:

(1)分离功能　①不同气体透过膜的透过系数不同,据此可以集富所需气体(如集富氧气),浓缩天然气等。②离子交换膜可用于海水淡化、硬水软化。③反渗透膜是一种选择性薄膜(如醋酸纤维素膜),它只让水通过而不让盐等杂质离子通过,将未净水或盐水加压到几十或上百大气压,从而超过其渗透压,杂质离子等不能通过膜,而水可以通过,从而达到海水淡化或制备超纯水的目的。④超滤膜可用于胶体分离、废液处理、溶液浓缩。⑤透析膜用于人工肾等人工器官。

(2)能量转化功能　它能将光能向化学能转化(如光解水以产生氢和氧),也可将光能转化为电能,用于有机薄膜太阳能电池,这是今后大面积利用太阳能的最好形式之一。

(3)生物功能　例如大多数动物细胞中,细胞膜内 K^+的浓度高于膜外,而 Na^+浓度低于

膜外。细胞上的膜蛋白能帮助维持这种浓度梯度，通常把这种作用分别称为钾泵和钠泵。又如肺泡的薄膜可扩张、收缩，使血液在膜上和空气接触，而血液又不会外流。在自然界中，生物体从体内细胞到外皮，其膜的功能得到精巧的发挥。

温差电效应 thermoelectric effect 温差电效应是由于不同种类固体的相互接触而发生的热电现象。它主要有三种效应：塞贝克（Seebeck）效应、佩尔捷（Peltier）效应与汤姆孙（Thomson）效应。

（1）塞贝克效应　若将导体（或半导体）A 和 B 的两端相互紧密接触组成环路，若在两联接处保持不同温度 T_1 与 T_2，则在环路中将由于温度差而产生温差电动势。在环路中流过的电流称为温差电流，这种由两种物理性质均匀的导体（或半导体）组成的上述装置称为温差电偶（或热电偶），这是法国科学家塞贝克 1821 年发现的。后来发现，温差电动势还有如下两个基本性质：① 中间温度规律，即温差电动势仅与两结点温度有关，与两结点之间导线的温度无关。② 中间金属规律，即由 A、B 导体接触形成的温差电动势与两结点间是否接入第三种金属 C 无关。只要两结点温度 T_1、T_2 相等，则两结点间的温差电动势也相等。正是由于①、②这两点性质，温差电现象如今才会被广泛应用。

（2）佩尔捷效应　1834 年佩尔捷发现，电流通过不同金属的结点时，在结点处有吸放热量 Q_p 的现象。吸热还是放热由电流方向确定，Q_p 称为佩尔捷热。其产生的速率与所通过的电流强度成正比，即

$$\frac{\mathrm{d}Q_p}{\mathrm{d}t} = \Pi_{12} J$$

其中 Π_{12} 称佩尔捷系数，其大小等于在结点上每通过单位电流时所吸放的热量。电流通过两种不同金属构成的结点时会吸放热的原因是在结点处集结了一个佩尔捷电动势，佩尔捷热正是这电动势对电流做正功或负功时所吸放的热量。考虑到不同的金属具有不同的电子浓度和费米能 E_F，两金属接触后在结点处要引起不等量的电子扩散，致使在结点处两金属间建立了电场，因而建立了电势差（当然，上述解释仅考虑了产生温差电现象的某一方面因素，实际情况要复杂得多）。由此可见，佩尔捷电动势应是温度的函数，不同结的佩尔捷电动势对温度的依赖关系也可不同。上述观点也能用来解释当电流反向时，两结对佩尔捷热的吸放应倒过来，因而是可逆的。一般金属结的佩尔捷电势为 μV 量级，而半导体结可比它大数个量级。

（3）汤姆孙效应　1856 年 W·汤姆孙（即开尔文）用热力学分析了塞贝克效应和佩尔捷效应后预言还应有第三种温差电现象存在。后来有人从实验上发现，如果在存在有温度梯度的均匀导体中通过电流时，导体中除了产生不可逆的焦耳热外，还要吸收或放出一定的热量，这一现象定名为汤姆孙效应，所吸放的热量称为汤姆孙热。汤姆孙热与佩尔捷热的区别是，前者是沿导体（或半导体）作分布式吸放热，后者在结点上吸放热。汤姆孙热也是可逆的，但测量汤姆孙热比测量佩尔捷热困难得多，因为要把汤姆孙热与焦耳热区分开来较为困难。

（4）温差发电器　温差电现象主要应用在温度测量、温差发电器与温差电制冷三方面。

温差发电是利用塞贝克效应把热能转化为电能。当一对温差电偶的两结处于不同温度时，热电偶两端的温差电动势就可作为电源。常用的是半导体温差热电偶，这是一个由一组半导体温差电偶经串联和并联制成的直流发电装置。每个热电偶由一 N 型半导体和一 P 型半导体串联而成，两者联接着的一端和高温热源接触，而 N 型和 P 型半导体的非结端通过导线均与低温热源接触，由于热端与冷端间有温度差存在，使 P 的冷端有负电荷积累而成为发电器的阴极；N 的冷端有正电荷积累而成为阳极。若与外电路相联就有电流流过。这种发电器效率不大，为了能得到较大的功率输出，实用上常把很多对温差电偶串、并联成温差电堆。

（5）温差电制冷器　根据佩尔捷效应，若在温差电材料组成的电路中接入一电源，则一个结点会放出热量，另一结点会吸收热量。若放

热结点保持一定温度,另一结点会开始冷却,从而产生制冷效果。半导体温差电制冷器也是由一系列半导体温差电偶串、并联而成。温差电制冷由于体积十分小,没有可动部分(因而没有噪音),运行安全故障少,并且可以调节电流来正确控制温度。它可应用于潜艇、精密仪器的恒温槽、小型仪器的降温、血浆的储存和运输等场合。

塞贝克效应　Seebeck effect　见“温差电效应”。

汤姆孙效应　Thomson effect　见“温差电效应”。

汤姆孙热　Thomson heat　见“温差电效应”。

温差发电器　thermo-generator　见“温差电效应”。

温差电制冷　thermoelectric cooling　见“温差电效应”。

中间温度定律　law of intermediate temperature　见“温差电效应”。

中间金属定律　law of intermediate metals　见“温差电效应”。

热电效应　thermoelectric effect　即“温差电效应”。

Acoustics
声　　学

声学 acoustics　研究声波的产生、传播、接收和效应的科学。声学是物理学中最早深入研究的分支学科之一，随着 19 世纪无线电技术的发明和应用，声波的产生、传输、接收和测量技术都有了飞跃发展，由此声学从古老的经典声学进入了近代声学的发展时期。近代声学的渗透性极强，声学与许多其他学科（如物理、化学、材料、生命、地学、环境等）、工程技术（如机械、建筑、电子、通讯等）及艺术领域相交叉，在这些领域发挥了重要又独特的作用，并进一步发展了相应的理论和技术，从而逐步形成为独立的声学分支，如物理声学、非线性声学、量子声学、分子声学、超声学、光声学、电声学、建筑声学、环境声学、语言声学、生物声学、水声学、大气声学、地声学、生理声学、心理声学、音乐声学及声化学等，所以现在声学已不仅仅是一门科学，也是一门技术，同时又是一门艺术。

一、振动与波
Vibration and Wave

振动 vibration　一个物体或弹性媒质中的质点受到激励后，由于弹性恢复力的作用，使物体或质点在其平衡位置附近作往返运动称为振动。

振动的状态与物体或媒质中的质点的特性和外界激励力的性质有关。振动的特征为：时间上的周期性和空间上的重复性。在物理学中研究一个系统的振动特性时常将被研究的对象等效成由质量、阻尼和弹性组成的一个系统。

振动的分类有多种方式，根据系统振动时受力的情况，振动可以分为自由振动和受迫振动；根据系统振动时受力的性质，又可以分为稳态振动和瞬态振动；根据振动的状态，又可以分为周期振动和随机振动等。描述一般振动的运动方程为

$$m\frac{d^2\boldsymbol{S}}{dt^2}=\boldsymbol{F}_1+\boldsymbol{F}_2+\boldsymbol{F}_3$$

式中 m 为质点的质量，$\boldsymbol{S}$ 为位移，$\boldsymbol{F}_1$ 为外力，$\boldsymbol{F}_2$ 为阻力，$\boldsymbol{F}_3$ 为恢复力。

周期 period　周期是描述振动的物理量，振动的物体往返运动一次所需的时间称为周期，用 T 表示，单位为秒。

作简谐振动的物体，在时刻 t 的位置和速度，与时刻 $t+T$ 的位置和速度完全相同，即

$$A\sin(\omega t+\varphi)=A\sin[\omega(t+T)+\varphi]$$

则简谐振动的周期为

$$T=2\pi/\omega$$

式中 ω 为圆频率。

频率 frequency　单位时间（通常为 1 秒）内振动循环的次数称为频率，用 f 或 ν 表示，单位为赫兹（Hz），1Hz＝1 次/秒。

频率在物理学中有广泛应用。例如，人耳的听觉就与频率有关，可听声的频率范围为 20～20000Hz；日常生活中使用的交流电的频率为 50Hz；广播电台也以它载波信号的频率为标志等。

圆频率（角频率） circular frequency　作简谐振动的物体的运动情况（位移，速度或加速度）可以用参考圆来描述。质点绕圆心，以振幅为半径的圆周上作匀速圆周运动，角速度为质点振动频率的 2π 倍。质点绕圆心旋转一周相当于振动循环一次。定义作匀速圆周运动的角速度 ω 为圆频率，又称为角频率，它也是描述单位时间内振动次数的一个物理量，它与频率 f 的关系为 $\omega=2\pi f$。

相位 phase　某一物理量随时间（或空间位置）作谐函数变化时，决定该量在任意时刻（或位置）的状态的一个数值，称为相位。

质点作简谐振动时，在参考圆上某一时刻的位置与圆心的连线和水平轴的夹角 $\omega t+\varphi$ 就是相位（ω 为质点作匀速圆周运动的角速度），它决定振动物体的运动状态。$t=0$ 时的相位

φ,称为初始相位,决定于振动物体的起始状态。

相位又称位相、周相或相。单位是弧度。

自由振动 free vibration 当一个系统受激励后,外力不复存在时,系统的振动称为自由振动。描述自由振动的运动方程见“振动”词条,其中外力 $\boldsymbol{F}_1$ 为零,它的运动状况决定于初始条件。如果系统在振动过程中保持能量不变(忽略阻尼的影响),则系统按本身的固有频率振动,即无阻尼自由振动,这就是简谐振动。

简谐振动 simple harmonic vibration 可以用单一频率的谐函数来描述的振动称为简谐振动。它是周期振动的一种简单形式。典型的简谐振动有弹簧振子、单摆、复摆和扭摆等。在忽略阻尼和理想的条件下,它们有共同的运动规律。例如,对于弹簧振子和扭摆在弹簧的线性范围内的运动;对于单摆和复摆在小振幅时的运动。描述它们的运动方程见“振动”词条,其中外力 $\boldsymbol{F}_1$ 和阻力 $\boldsymbol{F}_2$ 为零,$\boldsymbol{F}_3$ 为线性恢复力,即与位移成一次方关系。典型的一维振动的运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-kx$$

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2x=0$$

式中 x 为位移,ω 为系统的固有频率,$\omega^2=k/m$,k 为弹性系数,m 为质点质量。

它的解为:

$$x(t)=A\sin(\omega t+\varphi)$$

或 $$x(t)=B\sin\omega t+C\cos\omega t$$

式中 A,φ 或 B,C 为待定积分常数,由运动的初始条件确定。

阻尼振动 damped vibration 一个系统受激后发生振动,如果没有外力的作用,由于系统在振动过程中受到阻力的作用,振动能量逐步转变成其他能量,振动逐步消失,这种振动称为阻尼振动。

阻尼振动能量的耗散方式通常有两种:一种为机械能转变成热能,这种阻力属于摩擦阻尼,例如,黏滞力遵循斯托克定律,它与速度成正比,空气(流体)阻力与速度平方成正比;另一种为振动系统引起周围媒质的振动,将机械能转变成声能向外辐射,例如,受激的板振动辐射声音。

对于阻尼与速度成正比的阻尼振动,振动系统中因为阻尼的存在导致振动的幅度随时间逐渐衰减,表示为 $A_0e^{-\beta t}$。系统的振动频率也因阻尼而偏离系统的固有频率,振动频率为 $\omega=\sqrt{\omega_0^2-\beta^2}$,$A_0$ 为无阻尼时振动幅值,ω_0 为固有频率,β 为阻尼因子。

受迫振动 forced vibration 一个系统受到外加激励力的作用而产生的振动。振动的能量由外加激励力提供,振动的特性与外力有关。

系统作受迫振动时,振动由二部分组成:一部分为自由振动,因为系统中存在阻尼,所以这部分振动随时间以 $e^{-\beta t}$的速率衰减(β 为阻尼因子);另一部分为由外力决定的振动。如果外力为连续的周期力,则系统以外界周期力的频率振动,外力提供的能量补充系统因阻尼而消耗的能量,这就是稳态振动。

稳态振动 steady-state vibration 当系统受到连续的周期性的外力作用时产生的振动。当外力提供的能量等于系统因阻尼而消耗的能量时,系统作稳态振动,系统以外加周期力的频率振动,因此,稳态振动是连续的周期性的受迫振动。

在周期力 $F_0\cos\Omega t$ 作用下典型的一维运动方程为

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}+h\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+kx=F_0\cos\Omega t$$

式中 m 为质点质量,h 为阻力系数,k 为弹性体的刚度,Ω 为周期力的频率。

方程的解为

$$x=A'e^{-\beta t}\cos(\omega t+\varphi)+A\cos(\Omega t+\Phi)$$

式中 $\beta=h/(2m)$,$\omega^2=k/m$,A'和 φ 由振动的初始条件决定,A 和 Φ 决定于外力。随着时间的增加第一项很快衰减,所以稳态振动遵循 $A\cos(\Omega t+\Phi)$的关系式,其中:

$$A=\frac{F_0/m}{\sqrt{(\omega^2-\Omega^2)^2+4\beta^2\Omega^2}}$$

$$\Phi=\tan^{-1}\left(-\frac{2\beta\Omega}{\omega^2-\Omega^2}\right)$$

瞬态振动 transient vibration 由外加瞬态激励引起的振动。瞬态过程是一种包罗万象的非周期确定性过程,其基本特征为持续时间较短的突发性过程,例如,飞机着陆,火炮发射,爆炸,地震,碰撞和冲击等都会激发瞬态振动。经常通过傅里叶变换,将时域上的瞬态振动转换成频域上的频谱来研究和分析瞬态振动的特性。

固有频率 natural frequency 系统自由振动时的频率,它由振动系统本身的物理特性决定。无阻尼振动时的固有频率仅由系统的弹性力和惯性力确定。例如,弹簧振子的固有频率决定于振子的质量 m 和弹簧的刚度 k,其固有频率为 $\omega_0=\sqrt{k/m}$;单摆的固有频率决定于摆的长度 l 和重力加速度 g,其固有频率为 $\omega_0=\sqrt{g/l}$。对于一个多自由度系统,固有频率就是简正振动频率。

共振 resonance 系统在受迫振动时,激励的任何微小的频率变化,都使响应减小的现象。这响应可以是振动的位移、速度或加速度。也就是说,系统在作受迫振动时,这些响应是频率的函数,在某些频率点出现极大值,这些频率点称为共振频率。

不同响应共振频率不同,当 $\Omega=\sqrt{\omega_0^2-2\beta^2}$ 时出现位移共振;当 $\Omega=\omega_0$ 时出现速度共振;当 $\Omega=\omega_0^2/\sqrt{\omega_0^2-2\beta^2}$ 时出现加速度共振,Ω 为外加周期力的圆频率,ω_0 为系统的固有圆频率,β 为系统的阻尼因子。

简正振动模态(方式) normal mode of vibration 振动或波动系统中的一种无阻尼的自由振动方式。系统的任何复合运动一般都可以分解为简正振动的和,它们中每一个简正振动模态可以是完全独立的。简正振动的频率称为简正频率。对于波动系统,其特点为在某一坐标方向上,具有一定的驻波或准驻波方式。

反共振 antiresonance 系统在受迫振动时,激励的任何微小的频率变化,都使响应增加的现象。这响应可以是振动的位移、速度或加速度。也就是说,系统在作受迫振动时,这些响应是频率的函数,在某些频率点出现极小值,这些频率点称为反共振频率。不同响应反共振频率不同。

阻尼 damping 振动系统中的能量随时间或距离而损耗的现象。

振动能量的损耗决定于阻尼力的作用,不同阻尼力的作用产生不同的阻尼效果。阻尼可以分为:干[摩擦]阻尼(阻尼力与质点振动速度的大小无关)、黏性阻尼(阻尼力与质点振动速度大小成正比)和非线性阻尼(阻尼力不与速度成正比)等。

黏性阻尼 viscous damping 见“阻尼”。

非线性阻尼 nonlinear damping 见“阻尼”。

干摩擦阻尼 dry friction damping 见“阻尼”。

临界阻尼 critical damping 当一振动系统的阻尼因子 β 在数值上等于系统的固有频率时,导致系统从偏离平衡位置处刚好回复到原有位置而无振动发生,这时的阻尼称为临界阻尼。

品质因素 quality factor 用来表征单自由度机械或电系统共振尖锐度或频率选择性的物理量,常称为系统的品质因素,即 Q 值。

在机械系统中,它是在一周内储存的最大能量与耗散的能量之比的 2π 倍。当阻尼比较小时,$Q=\omega_0/(2\beta)$(ω_0 为系统的固有频率,β 为阻尼因子)。在电系统中,$Q=\omega L/R$,ω 为系统的谐振频率,L 为电感,R 为电阻。

耦合振动 coupling vibration 由若干个振动系统组成的,它们的振动模态不是独立的,而受到从一个模态到其他模态的能量传递影响的振动。

在耦合振动系统中不能确定哪一个系统激励,哪一个系统被激励,因为它们之间是相互影响的。耦合系统中允许存在多个振动方式,其对应的振动频率就是简正频率。

李萨如图 Lissajous' figure 两个频率不同,振动方向互相垂直的谐振动,其合成后的运动轨迹构成的图形,称为李萨如图(李萨如,法国物理学家,Jules Antoine Lissajous,1822～1880)。

通常在示波器的 x 轴和 y 轴分别输入不同频率(两频率成简单整数比)的信号,在示波器上出现稳定的规则的封闭曲线,即李萨如图。

可以根据这图形来确定两个信号的频率比，如果已知一个信号的频率，则可以用它检测另一个信号的频率。

假设在水平方向和垂直方向作直线（直线不能通过图形的交点处）与李萨如图相交的点的数目分别为 n_x 和 n_y，则

$$\frac{f_y}{f_x} = \frac{n_x}{n_y}$$

式中 f_y 和 f_x 分别为加到 y 轴和 x 轴的信号频率。

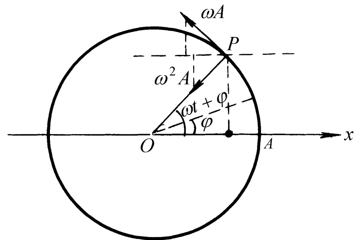
线性振动 linear vibration　指用常系数线性微分方程描述的振动。在线性振动的分析中能够应用能量叠加原理，振动的固有频率与其振幅无关。

振动系统中的回复力与位移成线性关系的振动，通常为线性振动。

非线性振动 nonlinear vibration　振动系统中回复力与位移不成线性关系，不能用常系数线性微分方程来描述的振动。

在非线性振动的分析中不能用能量叠加原理，振动的固有频率与其振幅有关。

参考圆 reference circle　简谐振动 $x = A\cos(\omega t + \varphi)$，可以用一个质点 P 在以圆心为 O，半径为 A 的圆周上作匀角速度运动来描述。该圆的半径等于简谐振动的振幅 A，P 点角速度 ω 为振动的圆频率。在时刻 t 时 $\overline{OP}$ 与 x 轴的夹角为该时刻的相位角，$\omega t + \varphi$。t 时刻 $\overline{OP}$ 在 x 轴上的投影即为该时刻的振动位移；t 时刻质点的切向速度 ωA 在 x 轴上的投影即为该时刻的振动速度；t 时刻质点的向心加速度 $\omega^2 A$ 在 x 轴上的投影即为该时刻的振动加速度，如图所示，这圆称为参考圆。根据上述分析，显然可以用矢量 $\boldsymbol{OP}$ 来代表质点 P 在 x 方向的简谐振动。



简谐振动的合成 composition of harmonic vibration　简谐振动是简单的，也是最基本的振动。许多实际复杂的振动都可以看成由多个简谐振动叠加而成。一个振子受若干个同方向的谐振动的作用，则该振子在某一时刻的位移为各谐振动在同一时刻单独产生的位移之和。不同频率的谐振动合成后不再是谐振动。

简谐振动的合成可以通过数学运算，例如，三角函数的运算，或复指数的运算进行，或用矢量表示简谐振动，通过矢量的叠加进行。例如，同方向，同频率的简谐振动的合成。设一个质点同时参与两个振动，它们的方程分别为

$$x_1 = A_1\cos(\omega t + \varphi_1)$$

$$x_2 = A_2\cos(\omega t + \varphi_2)$$

质点的合位移

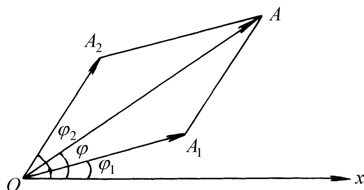
$$x = x_1 + x_2 = A\cos(\omega t + \varphi)$$

式中

$$A = \sqrt{A_1^2 + A_2^2 + 2A_1A_2\cos(\varphi_1 - \varphi_2)}$$

$$\tan\varphi = \frac{A_1\sin\varphi_1 + A_2\sin\varphi_2}{A_1\cos\varphi_1 + A_2\cos\varphi_2}$$

也可用矢量迭加得到，如图所示。



拍 beat　由于两个或多个同类型而不同频率的波的线性或非线性叠加而引起的现象。

对于两个频率分别为 f_1 和 f_2 的简谐信号，线性叠加的结果，形成幅值按差频 $f_1 - f_2$ 周期性增减的信号。人们可以利用差拍现象设计振荡器，例如，拍频振荡器，或用来对未知频率进行校准（必须有一个已知频率的信号源）。

波 wave　由机械振动或电磁振荡的传播所形成的一种运动形式。一般用某一物理量的幅值以及幅值如何随空间和时间变化来描述。

机械振动在媒质中产生以一定速度传播的扰动，它是一种机械波。媒质必须有弹性和惯

性，媒质要有弹性是为了提供一个力使质点的位移能回复到它原来的位置，媒质要有惯性是为了使运动的质点能把动量传递给邻近的质点。

电磁振荡产生的是电磁波。它不是机械波，因而可以在真空中传播。电磁波的速度取决于波在其中传播的媒质，它在真空中传播的速度为一常数，$c=2.998\times10^8\mathrm{m/s}$。

人们在日常生活中接触最多的是声波（一种机械波）和光波（一种电磁波）。

简谐波　simple harmonic wave　波源作简谐振动时，扰动在媒质中传播形成简谐波。它是最简单，最基本的波动。任何复杂的波都可以看做是不同振幅和不同频率的简谐波的合成。

假设简谐波源在 y 方向的振动方程为 $y=A\cos\omega t$，则在弹性媒质中沿 x 方向产生的简谐波可以表达为

$$y=A\cos(\omega t-kx)=A\cos\omega\left(t-\frac{x}{v}\right)$$

式中 A 为振幅，ω 为圆频率，k 为波数，v 为波速。

上式表明在波的传播方向上各质点之间的相互关系。在某一时刻，坐标位置为 x 的质点，它的波动幅值为 y，最大振幅为 A，它与波源的相位差为 $\omega x/v$，波动从波源到该点所需的传播时间为 x/v，波的传播速度为 v。

波长　wave length　在波的空间分布中，相邻的同相位的两点之间的距离。它也是媒质中扰动在一个周期内传播的距离，通常记作 λ。因此，波的传播速度等于频率乘以波长的积。

波数　wave number　在波的传播方向上，单位长度内波长的数目，即波长 λ 的倒数 $1/\lambda$。有时也规定波数为 $2\pi/\lambda$。当传播距离为一个 λ 时，则两点之间的相位差为 2π，传播距离乘以波数的积，再加上初始相位，即为某一时刻空间该点的相位。

波数一般为复数，其实部的物理含义如上所述，其虚部表示波在传播过程中的衰减或吸收。波数有时又称为传播常数。

波矢　wave vector　用来表示波动的矢量，常用符号 $\boldsymbol{k}$ 表示。波矢的方向与波前垂直，其大小等于波数 $2\pi/\lambda$，即

$$|\boldsymbol{k}|=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{\omega}{v}$$

式中 λ 为波长，ω 为介质质点振动的圆频率，v 为波速。

相速度　phase velocity　扰动在媒质中传播时，空间各点的相位依次滞后于源振动的相位，在波动的媒质中相位固定的某一点沿传播方向的速度，称为相速度。相速度实际上就是波传播的速度。

波的相速度与媒质的特性有关。例如，固体中纵波的相速度，$v_l=\sqrt{Y/\rho}$（Y 为媒质的杨氏模量，ρ 为媒质的密度），横波的相速度 $v_t=\sqrt{n/\rho}$（n 为媒质的切变模量）。空气中的相速度 $c=\sqrt{(\gamma p_0)/\rho_0}$（$\gamma$ 为空气的比热比，p_0 为大气的静压强，ρ_0 为空气的密度）。弦中的横波的相速度 $v_s=\sqrt{T/\rho_1}$（T 为弦中张力，ρ_1 为弦的线密度）。

群速度　group velocity　两种或两种以上同类型的波以接近的频率和波长在同一媒质中传播或非正弦扰动在媒质中传播时，其包络上具有某种特性（例如，最大幅值）的点在传播方向上的速度，称为群速度，它是一个矢量。例如，波包的最大幅值的传播速度为

$$|\boldsymbol{v}_g|=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}$$

式中 ω 为圆频率，k 为波数。

群速度是波群能量在媒质中传播的速度，只是在频散媒质（不同频率的波在媒质中传播速度不一样）中，群速度与相速度才有差别。

频散　dispersion　由于波在媒质中传播的速度随频率变化而引起波的正弦分量的离散。当有频散时，不同频率成分组成的波包会发生弥散，使接收信号的波形相对于发射信号产生畸变。

声频散现象与媒质内部微观结构的弛豫过程有关。例如，在二氧化碳中当频率小于 10^5Hz 时，声速为一常数，大于该频率时，随频率的增加声速增大，到 10^6Hz 时声速又为另一个常数。

波阵面　surface wavefront　在媒质中向前传播的波，在同一时刻相位相同的各点连成的

面。它形象地描述了某一时刻在媒质中扰动到达空间各点的位置。在波传播过程中领先的波阵面又称为波前,垂直通过行波波阵面上的线,称为波线。

点声源产生的波阵面为球面,其波线是垂直于波前并通过球心的一组射线。均匀管子一端的平面活塞,受到周期力的作用,在管中可以产生波阵面为平面的声波。

平面波 plane wave 波阵面处处为平行的平面,且垂直于传播方向的波。平面波是一种最简单的波型,常用以研究波的传播特性。然而,声波只有在截面均匀的管中传播时方能获得平面波,其条件是当声源的频率低于管子的截止频率时,方能在管中产生平面波。

平面声波在理想媒质中传播时具有下列特性:(1)声压和质点速度同相位;(2)声压不随距离变化;(3)媒质中质点速度不随距离变化;(4)声阻抗率等于媒质的特性阻抗 $\rho_0 c$;(5)平面波的声强为 $I=p\cdot v=p_m^2/(2\rho_0 c)$;(6)平面波的声功率为 $W=I\cdot S=p_m^2 S/(2\rho_0 c)$。(以上式中:$p$ 为声压;v 为质点速度;p_m 为声压幅值;ρ_0 为媒质密度;c 为声速;S 为截面积)

球面波 spherical wave 波阵面为同心球面的波。球面波的波线是与其波前垂直的许多通过球心的法线。

一个点源(半径比其辐射波的波长小很多的源)在各向同性的媒质中辐射的波为球面波。

球面声波在理想媒质中传播时具有下列特性:(1)声压与球面波半径成反比;(2)声压与振动速度之间相位差与 kr 成反比;(3)媒质的声阻抗率为复数,当波阵面的半径很大时,纯抗分量可以忽略;(4)在波阵面的半径很大时,球面波的声强为 $I=p_m^2/(2\rho_0 c)$,因为声压与距离成反比,所以声强与距离的平方成反比;(5)辐射的声功率 $W=2\pi r^2 p_m^2/(\rho_0 c)$。(以上式中:$p_m$ 为声压的幅值,r 为离开声源中心的距离,k 为波数,ρ_0 为媒质的密度,c 为声速。)

柱面波 cylindrical wave 波阵面为同轴的柱面的波。

一个直线源在各向同性的媒质中辐射的波为柱面波。线源可以由很多个相距很近的点源排列成一直线组成。当各个点源同相位辐射,且辐射的波长比点源之间的间距大很多时,这个点源阵就可以看成是一个线源。

柱面声波在理想媒质中,传播时具有下列特性:(1)声压近似地与距离的平方根成反比;(2)媒质的声阻抗率为复数,当 kr 很大时声抗的分量可以忽略;(3)在距离较大时,柱面波的声强 $I=A/(\pi kr)(\rho_0 c)$,声强与距离成反比;(4)单位长度的源辐射的声功率 $W=2A/(k\rho_0 c)$。(以上式中:A 是柱面波的幅值,k 是波数,r 为距离,ρ_0 为媒质的密度,c 为声速)

行波 travelling wave, progressive wave 因为媒质具有弹性和惯性,当媒质受到周期性扰动时,通过激励媒质中质点的周期性运动和质点之间的相互作用,使得扰动在媒质中传播产生波。在媒质中不受边界影响而传播的波称为行波。

驻波 standing wave 由频率相同而传播方向相反的两列同类型行波的相互干涉而形成空间分布固定的周期波。驻波的特点是具有固定于空间的波节或次波节和波腹。例如,弹拨两端固定的弦,在弦中会产生沿弦正方向传播的波 u_1,在端点处产生反方向行进的反射波 u_2,则在弦中同时存在振幅和频率相同,行进方向相反的两列波。当满足弦的端点的边界条件,并忽略波的衰减,这两列波发生干涉得到驻波 u:

$$u_1 = A\cos(\omega t - kx)$$

$$u_2 = A\cos(\omega t + kx + \varphi)$$

$$u = u_1 + u_2 = 2A\cos\left(kx - \frac{\varphi}{2}\right)\cos\left(\omega t + \frac{\varphi}{2}\right)$$

(对于两端固定的弦可以得到 $\varphi=\pi$)

式中:A 为波的振幅,ω 为波的圆频率,k 为波数,$k=2\pi/\lambda$,λ 为波长,φ 为 u_1 与 u_2 的相位差。

当 $\left|\cos\left(kx-\frac{\pi}{2}\right)\right|=1$ 时,驻波 u 的振幅最大,等于 $2A$,即为振幅波腹。

当 $\cos\left(kx-\frac{\pi}{2}\right)=0$ 时,驻波 u 的振幅为零,即为振幅波节。

波腹的位置 $x=\pm\left(n+\frac{1}{2}\right)\cdot\frac{\lambda}{2}$

波节的位置　$x = \pm n \cdot \frac{\lambda}{2}$

$n=0,1,2,\cdots$ 为正整数

有一定边界的薄板或膜片受到激励，可以在其中产生二维的驻波，如能显示波节和波腹的平面分布，则可以得到规则的图案。在房间或闭合空间中的空气受到激励，可以产生三维空间的驻波，在这空间中允许存在的驻波称为简正波，其相应的频率称为简正频率。

波腹　antinode, loop　在驻波场中描述声场特性的某些物理量的幅值为最大的点、线或面。这些物理量可以是声压、质点位移、质点速度和质点加速度等。因此，描述波腹时应说明波腹的类型。例如，声压波腹、位移波腹或速度波腹等。

波节　node　在驻波场中描述声场特性的某些物理量的幅值为零的点、线或面。这些物理量可以是声压、质点位移、质点速度和质点加速度等。因此，描述波节时应说明波节的类型。例如，声压波节，位移波节或速度波节等。

当这些物理量的幅值在驻波场中不为零，而为极小值时，称之为次波节。

波包　wave packet　波包是在波动现象中不同波长的波（分波）的叠加。它所形成的合成振幅除了空间一个有限部分外，均小得可以忽略，而这一有限部分的线度，即为波包的线度。

如果不同波数的波，形成处于 Δk（k 为波数）内的一维波包，则波包的最小线度 $\Delta x \approx 1/\Delta k$，当所有分波在同一方向运动时，波包的速率是在 k 的平均值处计算的群速度

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

式中 ω 为波的圆频率。

当相速度 v 依赖于波长 λ 时，$v_g \neq v$，而且，Δx 随时间而变化。

调幅波　amplitude modulated wave　为了利用波的传播特性来传递信息，将所需传递的信息（例如，语言、音乐或图像信号）对波的振幅进行调制（用于被调制的波称为载波），振幅调制以后的波称为调幅波。

接收端只要对调幅波的振幅解调，即可得到该波所携带的信息。因为外界的噪声干扰主要是振幅干扰，因此调幅波的信号容易受到干扰。

调频波　frequency modulated wave　为了利用波的传播特性来传递信息，将所需传递的信息（例如，语言、音乐或图像信号）对波的频率进行调制，频率被调制的波称为调频波。

接收端只要对调频波的频率解调，即可得到该波所携带的信息，因为外界的噪声干扰对频率的干扰很小，因此被解调的信号质量较高。

机械波　mechanical wave　机械振动在媒质中的传播所形成的波动。在弹性媒质中，只要有一个质点受到激励发生振动，则它周围的质点由于具有惯性和在媒质的弹性力的作用下也会发生振动，但是与前者存在一定的相位滞后。同样的理由，接着近邻的质点又在这些质点的带动下振动起来，只是比最先振动的质点滞后更大的相位，像这样由近及远地影响下去，机械振动就以一定的速度由近及远地向各个方向传播开去，形成机械波。产生机械波必须具备能激发波动的振动系统作波源和能传播机械振动的具有一定质量的弹性媒质。

声波是机械波。

重力波　gravitational wave　1918 年爱因斯坦（Albert Einstein）在作为引力理论的广义相对论中提出了光速行经空间的重力扰动的基本方程式，在解中出现重力波。如果重力波确实存在，则它必然带有能量，但其强度（或所传递的能量）则非常微小。

1959 年英国物理学家狄拉克（P. A. M. Dirac）成功地将重力场方程式加以量子化，而给出了重力量子或“重力子”。它的能量等于普朗克常数 h 乘以重力波的频率——与光子能量的公式相同，而重力子的自转角动量则为光子的两倍。

物质之间的相互作用可以分为四大类：强作用；电磁作用；弱作用；引力作用。引力作用是任何粒子都参与的作用，比弱作用还弱。

此外，流体的自由界面上，由于重力所引起的表面波也称为重力波。若液体的密度为 ρ，深度为 h，重力波的波长为 λ，则波速为

$$v = \sqrt{\frac{g\lambda}{2\pi}\tanh\frac{2\pi h}{\lambda}}。$$

孤[立]波 solitary wave 一个在传播过程中保持原有特性的,能量不会弥散到越来越大的空间区域的孤立的波。它是仅有一个孤立波峰的非线性波,它遵循非线性方程。

孤立波于1834年由J.Scott Russell在浅水渠道中首先发现。孤立波在均匀截面渠道中可不变形地传播。

谐波 harmonic 在周期性振荡中,频率等于基频整数倍的正弦分量。例如,频率等于基频二倍的波称为二次谐波,三倍的波称为三次谐波等。

谐波一般是由振动和传播的非线性引起的。在电子设备或仪器中,由于放大的非线性或物理量之间转换的非线性而引起的频率为基频整数倍的正弦分量也称为谐波。

分谐波 subharmonic 频率等于一个周期性振荡基频的整分数的正弦分量。例如,频率等于基频二分之一的波称为二次分谐波,三分之一的波称为三次分谐波等。分谐波一般是由振动和传播的非线性引起的。

频谱 frequency spectrum 把某一随时间变化的物理量按幅值或相位表示为频率的函数的分布图形。谱可能是线状谱、连续谱或二者之和。

一般频谱中横坐标为频率或圆频率,纵坐标即为某一物理量(例如,强度,速度和声压等)的幅值或相位。

线状谱 line spectrum 由一些离散频率成分形成的谱。例如,简谐振动和周期振动都具有离散的线状谱。

连续谱 continuous spectrum 在一定频率范围内含有连续频率成分的谱。例如,随时间衰减的振动和冲击过程都具有连续的频谱。

倒频谱 cepstrum 信号的对数功率谱的逆变换。它具有时间因次,为了与通常频率函数的频谱相区别,有时称它为时谱。

倒频谱与对数功率谱是一对傅里叶变换,正如自相关函数与功率谱是一对傅里叶变换。其差异在于倒频谱是功率谱在对数坐标下的傅里叶逆变换,而自相关函数是功率谱在线性坐标下的傅里叶逆变换。

倒频谱用于对频谱作进一步的分析,常常用它检测信号中反射波、延迟和未知波形的重复弱波。

谱密度 spectrum density 信号通过理想滤波器,当滤波器带宽趋近于零时,每单位带宽的均方值输出。它相当于某一信号(例如,声压,振动速度等)的均方值除以带宽,当带宽趋近于零时的极限值。

功率谱密度 power spectrum density 功率谱密度分为自功率谱密度和互功率谱密度。

若随机信号 $x(t)$ 的自相关函数为 $R(\tau)$,

$$R(\tau)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T x(t)x(t+\tau)\mathrm{d}t$$

则 $x(t)$ 的自功率谱密度为它的自相关函数 $R(\tau)$ 的傅里叶变换 $S(\omega)$,

$$S(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}R(\tau)\mathrm{e}^{-i\omega\tau}\mathrm{d}\tau。$$

若两个信号 $x(t)$ 和 $y(t)$ 的互相关函数为 $R_{xy}(\tau)$,

$R_{xy}(\tau)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T x(t)y(t+\tau)\mathrm{d}t$ 则 $x(t)$ 和 $y(t)$ 的互功率谱密度为互相关函数 $R_{xy}(\tau)$ 的傅里叶变换 $W(\omega)$,

$$W(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}R_{xy}(\tau)\mathrm{e}^{-i\omega t}\mathrm{d}t。$$

功率谱密度常用于随机信号的分析中,它用信号的均方值的谱密度来描述信号的频率特性。例如,随机振动中的加速度,力和速度等。

主频 basic frequency 一个包括很多不同频率成分的复杂信号中最主要的频率。

对于一个被驱动的系统,主频就是驱动频率。对于一般的语言和音乐节目信号,主频是指信号的基频。

惠更斯原理 Huygens principle 1690年荷兰物理学家惠更斯提出:媒质中扰动的传递过程中,波前上所有点都可以认为是产生球面次级子波的新波源。在时间 t 以后,波前的新位置将是和次级子波相切的曲面。应用这原理可以由某一时刻的波前的位置用几何作图的方法来确定下一时刻波前的位置和波传播的方向。可以用惠更斯原理来解释波传播中的反射、折射和衍射等现象,而不涉及波的性质和波的类型。

波的干涉 interference of wave 由两个或多

个频率相同，振动方向相同，有不同相位和传播方向的波的叠加而引起的现象。

在两列同频率，具有固定相位差的波叠加的波场中，任一位置上的平均能量密度并不简单地都等于两列波的平均能量，而是与两列波到达该位置时的相位差有关，两列波的相位相同的位置上加强；两列波的相位相反的位置上相消，这就是波的干涉现象。

具有相同频率，且有固定相位差的波称为相干波。具有不同频率或频率相同但相位差不确定的波称为不相干波。

波的衍射　diffraction of wave　在媒质中由于有障碍物或其他的不连续性而引起波改变传播方向的现象。如障碍物的尺寸远小于波长，则衍射不明显；如障碍物的尺寸与波长相近时，则衍射最明显；如障碍物的尺寸远大于波长时，虽然还有衍射，但是在障碍物背部边缘附近将形成一个没有波的区域(即声影区)。

声衍射波是传播方向因媒质中障碍物或其他的不连续性而改变的波，通常不计及反射和折射作用。

反射　reflection　波从两种媒质的界面折回的现象。

当声波从一种媒质入射到声学特性不同的另一种媒质时，在两种媒质的界面处将发生反射，使入射声波的一部分能量返回第一种媒质。在斜入射时，反射角 θ_2 与入射角 θ_1 相等；垂直入射时，$\theta_1=\theta_2=0$。

在反射点处，反射声波声压 p_2 与入射声波声压 p_1 之比称声压反射系数 $R=p_2/p_1$；反射波的声强与入射波的声强之比称为声强反射系数。

折射　refraction　因媒质中波的传播速度的空间变化而引起波传播方向改变的现象。

声波的折射满足折射定律：入射角的正弦和折射角的正弦之比等于两媒质中声速的比值。也指在同类媒质中，由于媒质本身不均匀而使传播方向改变的现象。例如，声波从海水中传入海底时，由于海水中声速往往随深度而发生变化，所以也不断发生折射。

临界角　critical angle　平面声波由声速较慢的第一媒质向声速较快的第二媒质入射时，使第二媒质中的折射角等于 90°的入射角称为临界角。若第二媒质为固体，则在固体中出现折射的纵波和横波。使纵波折射角为 90°的入射角称为第一临界角，使横波折射角为 90°的入射角称为第二临界角，恰好产生表面波(又称瑞利波)的入射角称为瑞利临界角。

声传播系数　sound propagation coefficient　对于无限长的均匀的系统，在相距单位距离的两相邻点测量的质点速度(或声压)复数比的自然对数。

声传播系数是一个复数，它的实数部分表征声传播的衰减特性，称为“衰减系数”，它的虚数部分表征声传播的相位变化，称为“相位系数”。

衰减系数　attenuation coefficient　见“声传播系数”。

相位系数　phase coefficient　见“声传播系数”。

二、物理声学
Physical Acoustics

物理声学　physical acoustics　研究声学中基本问题的科学，是声学中最主要的分支学科之一。物理声学研究声振动的基本规律、声波在各种媒质(包括气体、液体、固体及等离子体等)及不同边界条件下的传播特性、以及声波与物质间的相互作用等。

波动声学　wave acoustics　用波动观点研究声学问题的一门分支学科。弹性媒质中声场随时间、空间变化的规律，在数学上由声波动方程描述，求得声波动方程满足边界条件的解，即可确定出声场中声压或质点速度等随时间和空间的变化，因而可完全定征声场特征，揭示出声场物理本质。由于数学上的困难，只在若干几何形状简单规则的情况下，才能得到波动方程的严格解析解。当然随着计算机技术的发展和应用，波动声学的数学可解的范围得以大大扩展。

几何声学　geometrical acoustics，ray acoustics　用声线的观点研究声学问题的一门分支学科

科。几何声学方法类似于几何光学方法，声音以射线形式传播，声线入射到物体表面时，一部分声能被吸收，另一部分声能被反射，如物体表面线度远大于声波波长，则声线的反射角等于入射角。几何声学也称射线声学。

射线声学 ray acoustics 参见“几何声学”。

统计声学 statistical acoustics 用统计学方法研究声学问题的一门分支学科。当声场中存在着许多大小、形状、声学性质各不相同的障碍物或散射体，或边界形状很不规则，这时声场变得极为复杂，求解波动方程已不可能。通常采用声线的观点研究声场。声线向各方向传播，遇到障碍物不断改变行进方向，结果声的传播完全处于无规状态，以致声场成为统计平均的均匀声场即扩散声场，因而可用统计学方法研究其平均自由程、平均吸声系数及平均声能密度等。

声波 acoustic wave, sound wave 弹性媒质中传播的压力、应力、质点位移、质点速度等的变化或几种变化的综合。传声媒质可以是气体、液体、固体及等离子体等。就质点振动方向与声传播方向关系而言，有纵波、横波、表面波等。声波的频率范围相当宽，从 10^{-4}Hz 到 10^{12}Hz 或更高，按照频率范围可将声波分为次声(10^{-4}～20Hz)、可听声(20～2×10^4Hz)、超声(2×10^4～5×10^8Hz)、微波超声(5×10^8～10^{12}Hz)和特超声(10^{12}Hz 以上，也有人把 10^9Hz 以上称特超声)。声波的能量范围也很宽广，人耳能听到的最小声压级为 0dB，火箭发射时噪声级可高达 180dB。

可听声 audible sound 泛指引起人们听觉感知的声波。可听声的频率范围大致为20Hz～20kHz，可听声一般简称为声音。近代听觉实验发现低于 20Hz 的声音信号，加大声音强度，人耳仍能听到，不过听觉阈值(人耳听到该频率声波的最低声压级)比较高。

次声 infrasound 频率低于可听声频率下限的声音，一般指低于 20Hz 的声音。近代听觉实验发现，加大声音的强度，次声仍然可以听到。

次声广泛存在于自然界和周围环境中。例如，火山爆发、地震、海浪和大气扰动、高速飞行的飞行器、高速行驶的车辆、压缩机和冷凝塔等都会产生次声。2Hz 以上的某些频率的次声对人体有影响。次声引起人们的烦恼和对人类身体健康的影响正成为一个新的研究课题。次声波在大气中传播时，因为衰减很小，所以可以传得很远。次声携带信息的监测技术，近年来引起人们的关注。

超声 ultrasound, ultrasonics 频率高于可听声频率上限(2×10^4Hz)的声波。超声频率的上限随科学技术的不断发展在不断提高，近年已能在实验室内产生出频率高到 10^{14}数量级的超声。对频率范围如此宽广的超声，通常又划分为微波超声(5×10^8～10^{12}Hz)和特超声(10^{12}Hz 以上的超声)。

微波超声 microwave ultrasonics 通常指频率在 5×10^8～10^{12}Hz 的高频超声。微波超声可用电、磁、光、热及超导隧道结等多种方法来产生和接收，微波超声在固体物理领域已得到广泛应用。近年来微波超声技术中还出现了另一些新的应用领域，如表面声波技术、声光技术等。

特超声 superultrasonics, hypersonic sound 通常是指频率在 10^{12}Hz 以上的超声。特超声的波长可与晶格长度相比拟，故传声媒质不能再视为连续的，因而特超声的产生、传播和接收的规律必须以量子力学、量子场论和量子统计力学来处理。特超声是固体物理领域中一种重要的研究手段。

声场 sound field, acoustic field 媒质中有声波存在的区域。描述声场的物理量可以是声压、质点振动速度、位移或媒质密度等，它们一般都是位置和时间的函数。声场中这些物理量随空间位置的变化与随时间的变化间的关系由声学波动方程描述，解出声波方程的满足边界条件的解即可知道声场随空间的分布、随时间的变化及能量关系等。

自由声场 free field 均匀各向同性媒质中，边界影响可以忽略不计的声场。“消声室”和室外空旷处是一种近似的自由声场。

近场 near field 声源向自由空间辐射时，声源附近声压和质点速度不同相的区域称为近场。

远场 far field 声源向自由空间辐射时，离

声源较远处声压和质点速度同相的区域,称为远场,远场中声波呈球面发散。

驻波声场 standing wave field 频率相同的自由行进声波叠加时因干涉形成的声能量空间分布一定的声场。驻波声场中波腹、波节的位置不随时间而变化,声能量也不随时间逐点传播。

声压 sound pressure 当媒质中有声波存在时,媒质受到波的扰动,其中压强发生了变化,在所考虑的瞬间,媒质中某一点所呈现的压强与静压强(媒质未受到扰动时的压强)之差称为瞬时声压。通常所说的声压是指在一定时间间隔内瞬时声压的方均根值,它是有效声压的简称。声压的单位为帕,记作 Pa,$1Pa=1N/m^2$。

质点速度 particle velocity 连续弹性媒质中小质团(理论上无穷小,但实际上仍包含大量分子)因声波传播而引起其在平衡位置附近的振动速度,单位为米每秒(m/s)。需要特别指出的是质点振动速度与声波传播速度是两个不同的概念,声波传播不是将媒质质点带走,媒质质点只在平衡位置附近作往返振动,声波带走的是质点振动的能量。如不特别说明,质点速度一般指有效值即方均根值。

体积速度 volume velocity 因声波传播引起的媒质通过某一指定面积的单位时间内的交变流量,它等于

$$U = \int_s u_n \mathrm{d}s$$

式中 U 为体积速度,u_n 为质点速度在表面 $\mathrm{d}s$ 法线方向的分量,面积分在指定的有声波通过的表面 s 上进行。

体积速度的单位为立方米每秒(m^3/s)。

声强 sound intensity(sound energy flux density, sound power density) 在指定方向上单位时间内通过垂直于该方向的单位面积的声能通量。声强是一个矢量,其方向由声能流的方向确定,其大小在不同条件下有不同的表达式。

在空气中,自由平面波或球面波的情况,在传播方向上的声强是

$$\boldsymbol{I} = p^2/\rho c$$

式中的 p 为有效声压(Pa),ρ 为媒质密度(kg/m^3),c 为声速(m/s)。

声强广泛用于声和振动的检测和控制,可以利用声强来进行声场分析,测量声源的声功率,识别噪声源,确定主要噪声源的位置,以及在结构声的研究中确定声能量的传递途径等。

声功率 sound power 单位时间内通过某一面积的声能。单位为瓦,记作 W。如果考虑包含声源的闭合曲面,则声功率表征单位时间内声源辐射的总的声能量。

在平面波或球面波声场,通过面积 s 的平均声功率(时间平均)为

$$W = p^2 \cdot s \cdot \cos\theta/(\rho \cdot c)$$

式中的 p^2 为有效声压平方的时间平均(Pa^2),ρ 为媒质密度(kg/m^3),c 为声速(m/s),θ 为面积 s 的法线与波法线之间的夹角(rad)。

在声功率测量中,如果在 Δs 面上的声强近似为常数,则

$$W = \sum_i \boldsymbol{I}_i \cdot \Delta \boldsymbol{s}_i。$$

声能量密度 sound energy density 声场中单位体积内包含的声能量。它与声压 p 的关系为 $\varepsilon = p^2/\rho c^2$,其中 ρ 和 c 为传声媒质的密度和声速。

像声压一样,声能量密度也有瞬时值,峰值和有效值之分,以及某位置处的时间平均声能量密度和某时刻的空间平均声能量密度。

声特性阻抗 acoustic characteristic impedence 平面自由行波在媒质中某一点的有效声压与通过该点的有效质点速度的比值,单位为帕秒每米(Pa·s/m)。

声特性阻抗等于媒质的密度 ρ 与声速 c 的乘积即 $Z_c = \rho c$。

平面自由行波声场中任一点的声阻抗率等于媒质的特性阻抗。

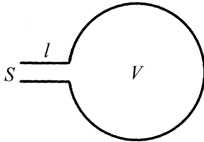
辐射指向性 radiation directivity 振动物体辐射声波时,由于声源上各面元的振动强度不同以及到达观察点的声程差不同,干涉结果造成在离声源相同距离、不同方向的位置上声强度不同,即辐射的声场随方向而异的特性。

亥姆霍兹共鸣器 Helmholtz resonator 长为 l,截面积为 S 的短管与体积为 V 的刚性壁空腔形成的一种简单声学共振系统。其共振

频率为

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{M_a C_a}}$$

其中 $M_a = \frac{\rho_0 l}{S}$ 为短管内空气柱的声质量，ρ_0 为空气密度，$C_a = \frac{V}{\rho_0 c_0^2}$ 为腔体声容，c_0 为声速。



级 level　某一物理量与同类基准量之比的对数。级的类别用名称表示，例如，声压级，声功率级和振动加速度级等等。对数的类别，对数的底以及比例常数不同，则得到不同级的单位，例如，贝(尔)，分贝和奈培等。

贝，分贝 bel，decibel　两个功率比值的无量纲单位，等于功率比值的常用对数

$$N = \lg \frac{P_1}{P_2}$$

式中 N 为贝数，P_1，P_2 分别为两个功率值。

分贝是贝尔的十分之一，符号为 dB，即

$$n = 10\lg \frac{P_1}{P_2}$$

式中 n 为分贝数。

在声压(或质点速度、电压、电流等量)的数值比等于功率比平方根的条件下，功率比值的分贝数可用下式表示：

$$n = 20\lg \frac{p_1}{p_2}$$

式中 p_1，p_2 是声压。

奈培 neper　表示两电流或两电压比值的单位，等于比值的自然对数：

$$\alpha = \ln \frac{\boldsymbol{I}_1}{\boldsymbol{I}_2}$$

式中 α 为奈培数，$\boldsymbol{I}_1$ 和 $\boldsymbol{I}_2$ 为电流。

如功率比正比于电流比的平方时，相应电流或电压的奈培数可用下式表示：

$$\alpha = \frac{1}{2}\ln \frac{P_1}{P_2}$$

式中 P_1，P_2 是功率。

1 奈培等于 8.68589 分贝(dB)。

在力学和声学中，奈培的定义可以引申使用于相当于电流(如速度、质点速度、体积速度)或电压(如力、声压)的数值比。

声压级(L_p) sound pressure level　有效声压 p 与基准声压 p_r 的比值的常用对数乘以 20，单位为分贝。基准声压必须说明。

$$L_p = 20\lg \frac{p}{p_r}$$

式中 p_r 是基准声压，空气中 p_r 常用 2×10^{-5} Pa，在水中常用 1×10^{-6}Pa。

声强级(L_I) sound intensity level　声强与基准声强之比的常用对数乘以 10，单位为分贝，即

$$L_I = 10\lg \frac{I}{I_r}$$

基准声强 I_r 必须指明，空气中 I_r 常取为 1×10^{-12}W/m²。

声功率级(L_W) sound power level　声功率与基准声功率之比的常用对数乘以 10，单位为分贝，即

$$L_W = 10\lg \frac{W}{W_r}$$

基准声功率 W_r 必须指明，空气中 W_r 常取为 1×10^{-12}W。

声级 sound level　用一定的仪表特性和 A、B、C 频率计权特性测得的计权声压级。所用的仪表特性和计权特性都必须说明，否则指 A 声级。基准声压也必须指明，在空气中取为 2×10^{-5} Pa。A、B、C 计权特性分别近似地为 40、70、100 方等响曲线的倒置曲线。计权特性用声级前的英文字母表示，如 A 声级 65dB，或简单表示为 65dB(A)。

纵波 longitudinal wave　媒质中质点的振动方向与声波传播方向平行的波。在纵波通过的区域里，只发生媒质的稠密和稀疏变化，故又称为疏密波，或称胀缩波、无旋波。

横波 transverse wave　媒质中质点垂直于声传播方向运动的波。横波只能在具有切变弹性的媒质中传播，故仅存在于高黏滞流体和固体中。在横波通过的区域里，媒质各处不发生体积变化，只有切向形变，故又称为等体积波，

或称切变波、有旋波。

切变波 shear wave 弹性媒质中使媒质各部分变形而体积不变的波。从数学上讲，切变波是速度场的散度为零的波，故又称为横波、等体积波或有旋波。

压缩波 compressional wave 弹性媒质中使媒质各部分改变体积而无转动的波。从数学上讲，压缩波是速度场中旋度为零的波。故又称为纵波、疏密波或无旋波。

体声波 bulk acoustic wave 在无限大弹性固体内部传播的声波。在有界媒质中传播的纵波和横波通常也称为体波。在各向同性固体中，有两种以不同速度、相互独立地传播的模式，即纵波和横波。在各向异性固体中，一般有三种以不同速度、相互独立地传播的模式，即准纵波、快准横波和慢准横波。

准纵波 quasi-longitudinal wave 在各向异性固体中，一般可传播三种波，各自具有不同的传播速度，且它们的质点振动方向既不与传播方向严格平行，也不严格垂直，而是成一定的角度。其中随着传播方向变化到某一特殊方向(此特殊方向称为纯波方向)而退化为纯纵波的那种模式称为准纵波，准纵波在传播方向有较强分量。随着传播方向变化到纯横波方向而退化为纯横波的另两种模式称为准横波，准横波在垂直于波传播方向上有较强分量。两种准横波由于具有不同的传播速度，又分别称为快准横波和慢准横波。

准横波 quasi-transverse wave 参见“准纵波”。

弧矢平面 sagittal plane 声波的传播方向和媒质的界面法线所构成的平面。

SH 波 shear horizontal wave 在固体界面上发生入射、反射和折射时，质点振动方向垂直于弧矢平面的横波。

SV 波 shear vertical wave 在固体界面上发生入射、反射和折射时，质点振动方向在弧矢平面内的横波。

声表面波 surface acoustic wave (SAW) 沿媒质表面层传播、幅值随离开表面的深度增大而迅速减弱的波。

瑞利波 Rayleigh wave 各向同性固体自由界面上传播的声表面波。瑞利波中质点作椭圆振动，椭圆平面与弧矢平面重合，质点位移幅值随深度增大以指数规律衰减，即波能量大部分集中在离界面约一个波长的深度内。

广义瑞利波 generalized Rayleigh wave 各向异性固体自由边界面上传播的瑞利波，其质点椭圆振动偏振面一般与弧矢平面有一交角。幅值随深度增大而振荡衰减，振荡幅度包络线呈指数关系。

乐甫波 Love wave 当满足一定条件时，可在覆盖于半无限固体表面上的另一固体薄层媒质中无衰减地传播的一种切变弹性波。此时该薄层媒质相当于一波导，波的能量全部限制在薄层中，不会向半无限媒质中辐射，即半无限媒质中波的幅值是随深度增大而迅速衰减的。对各向同性材料，可传播无衰减乐甫波的条件是：(1)半无限媒质的切变波速度大于薄层媒质中切变波速度；(2)频率须大于某临界频率。

斯顿莱波 Stonely wave 在两种固体媒质界面处，当这两种媒质材料参数满足一定关系时，可传播一种类似于自由表面瑞利波的界面模式。波在分界面两侧的质点位移幅值均随离开界面的距离增加而衰减，波的能量集中在界面附近约 1～2 个波长范围内。

板波 plate wave 无限大板状固体媒质(具有上下两平行自由界面)中传播的弹性波。最常见的为 SH 波和 Lamb 波。板波的特点有：(1)多模式，一般可分为对称和反对称的；(2)绝大部分模式是频散的；(3)绝大部分模式都有截止频率。

兰姆波 Lamb wave 板波的一种。与瑞利波一样，质点振动轨道是椭圆，椭圆平面与弧矢平面重合。兰姆波是多模式的，可分为对称和反对称两大类：对称模式中板的上下界面上的质点位移的垂直分量相对于板中性面而言大小相等、方向相反，因而板表现为周期性膨胀和收缩，因而又称为胀缩模式；反对称模式中板的上下界面上的质点位移的垂直分量相对于板中性面而言大小相等、方向相同，因而板表现为周期性弯曲，故又称为弯曲模式。

弯曲波 bending wave, flexural wave 板或

棒(梁)作弯曲运动而传播的横波。其质点振动方向与棒轴或板面互相垂直,随着弯曲波的传播,伴有板或棒的弯曲。弯曲波的传播速度与频率有关,是一种频散波。

蠕波(爬波) creeping wave 当声波入射到圆柱或圆球等物体上时,有一部分声波会沿其表面传播,同时又不断地沿切线方向向外辐射,成为绕圆周二次、三次的一串声波且均沿切线方向向外辐射。因它们环绕圆柱或圆球表面的速度小于周围媒质中的声速,故称这些波为蠕波。

漏波(漏表面波,伪表面声波) leaky surface wave(pseudo surface wave) 在半无限各向异性晶体的自由表面上,在某些特殊切割和传播方向,一种既沿自由表面传播,又向晶体内部辐射体波的表面波。由于能量辐射,故它沿表面 是衰减的,且有体波存在,与表面波最初定义相违,故又称为伪表面波。

妹泽波 Sezawa wave 半空间各向同性固体表面上存在一薄层另一种各向同性固体时,在固体层材料的横波速度远小于半空间固体材料的横波速度的条件下,可以传播类似固体层中兰姆波(Lamb wave)的对称和反对称两族波模式。在反对称模式族中,最低阶无衰减传播模式的波称为妹泽波。最低阶是指对一定层厚的材料,频率从零逐渐增加时,第一个出现的无衰减传播模式。

声电波 acousto electric wave, B-G wave 沿某些压电固体自由表面的某些方向可传播一种纯切变表面声波,其质点的振动方向平行于表面而垂直于传播方向。此时机械扰动和电磁扰动不会互相脱离而单独存在,这种声电耦合波称为声电波。又称为"布鲁斯坦(Bleustein)-古里亚耶夫(Gulyaev)波"(简称为B-G波)。

多普勒效应 Doppler effect 当波源和观察者相对运动时,观察者接收到的波的频率与波源发出的频率有差异的现象。当两者相向运动时,观察者接收到的频率升高;反向运动时频率降低。由此效应引起的频率变化数值称为多普勒频移。

当声源和观察者都运动时,观察者接收到的声波频率 f 可表示为

$$f = \frac{c \pm v_0}{c \pm v_s} F$$

F 为声源的频率,c 为媒质中的声速,v_0 为观察者相对媒质的运动速率,观察者向着声源运动时,v_0 前面取正号,反之取负号。v_s 为声源相对于媒质的运动速率,声源向着观察者运动时,v_s 前面取负号,反之取正号。

热声效应 thermoacoustic effect 包括两种现象,一种是由强度时变的光束、电子束或离子束等照射物体时,在媒质内部形成一局域的时变热源,进而使周围的媒质热胀冷缩,激发出声波的现象;另一现象是指声制冷;合适的声振动将使介质能从低温热源吸热,而在高温热源处放出,即所谓热泵,利用此热泵可构成声制冷机,目前实验室研制的声制冷机可获得−80℃左右的低温。

有限波束衍射 limited beam diffraction 空间有限的声波束在传播过程中,由于波动性导致部分声能偏离原来传播方向即声束扩散的现象。

(超)声空化 ultrasound cavitation 由于螺旋桨的高速旋转,或高声强声波的负压半周期等原因,使液体中局部压力降低而在微小的气体核周围形成气泡或空腔的现象,这些气泡称为空化气泡。这些小气泡随声压变化作强烈的生长和更加强烈的闭合运动,最后甚至形成崩溃,导致局部区域的高温、高压,并伴随有空化噪声。液体中足以产生空化现象所需的最小压强称为空化阈。

声致发光 sonoluminescence 声能量转化为光能量的现象。当驱动超声场的强度超过某一阈值时,液体中便会出现大量气泡即超声空化现象,气泡半径通常在微米级范围,当声强继续加大,声场对空化泡膨胀后的激烈压缩,导致气泡溃灭而发光称为多泡声致发光。在高度除气的纯水中形成稳定的驻波场,用注入气泡的方法可实现单泡声致发光,这是一个在空间上定位、时间上与驱动声场同步的气泡脉冲发光过程。单泡声致发光的气泡半径压缩比可达100左右,气泡中能量密度可上升12个数量级,闪光的宽度在50～380ps范围,色谱

温度在16400～30000K之间，因而引起声学界、物理学界的高度重视。特别是声致发光使声能量高度局域化，可用来加速化学反应，也吸引了核聚变工作者的兴趣。

大气声学 atmospheric acoustics　研究大气中声波的发生、传播、接收及衰减的声学分支。由于次声传播时衰减很小，所以大气声学重点研究次声传播特性及其在远距离爆炸定位、地震及风暴的预报等方面的应用。

分子声学 molecular acoustics　研究声波传播与物质分子特性间的关系的一门声学分支学科。借助于声波与物质分子间的相互作用，通过对声波传播特性如声速、频散、衰减等的测量和研究，可以揭示这些媒质中由于分子运动造成的质量、动量和能量输运过程、材料黏弹特性机理及弛豫过程等，从而深化对气体、液体、高分子聚合物及团体介质内部结构的认识。

三、非线性声学 *Nonlinear Acoustics*

非线性声学 nonlinear acoustics　研究大振幅声波传播过程中的非线性现象的声学分支学科。当声波振幅大到一定程度时，描述声波过程的运动方程、连续性方程和媒质状态方程的非线性项已不可忽略，因而得到的是非线性声波方程。此时声扰动的传播速度与扰动的强弱有关，结果声波传播过程中产生波形畸变、声饱和、声波与声波非线性相互作用等一系列非线性现象。

大振幅声波 sound wave of finite amplitude　当声波振幅大到使其在媒质中传播时非线性现象不能忽略的声波。

冲击波 shock wave　冲击在媒质中的传播。其特点是经过冲击面时，空气压力、密度和温度有显著的突然的变化。这突然变化从数学上讲是由一个值跳到另一值，但是从物理意义上说，由于损耗力的存在，变化是连续的，只是发生在很短（一般大约是分子自由程的十倍）的距离内。

在空气中飞行的飞行器，当其速度大于空气中的声速时会产生冲击波，又称激波。

轰声 sonic boom　以超音速运动的物体所引起的冲击波噪声。轰声传播到地面时听起来犹如爆炸声。

轰声的压力扰动首先是突然压缩，然后是缓慢膨胀，最后是另一个快速压缩的过程，波形犹如字母N，故又称为N波。

声辐射压力 acoustic radiation pressure　声场中物体所受到的声压的时间平均作用力。在线性声学范围内，如果声压随时间作周期变化，则时间平均作用力为零；但如果考虑非线性效应，则时间平均值不为零。声辐射压力与声能量密度成正比。

逾量吸收 extra-attenuation　声波非线性传播时，声波能量由基频向高次谐波转换，对基频而言，出现除媒质吸收外附加的能量衰减，这部分非线性传播引起的附加衰减称为逾量吸收。

声饱和 acoustic saturation　在线性声学范围内，声场中声压随声源发射功率的增加而增加。但当声源功率足够大以后，由于声波的大振幅及媒质的非线性效应，声波传播的非线性特性愈加明显，导致波形畸变，谐波产生，即声能量由基频向高频转换。如声源增加的功率完全损失于这种由基频向高频的转换，则接收点的基频声压不再随声源功率增加而增加，这种现象称为声饱和。

四、量子声学 *Quantum Acoustics*

量子声学 quantum acoustics　以量子力学和量子场论为基础，研究固体中特超声的产生、检测和传播规律，声子与其他粒子和微观结构的相互作用，以及量子液体——液氦中的声学现象的一门声学分支学科。量子声学的基本物理模型由于特超声的频率高、波长短，此时媒质不能再看做是连续的，而认为是离散的。

声子 phonon　结晶态固体的原子或分子是

按一定规律排列在周期性晶格上，并处于相互作用力场中。据量子论，每一晶格上的原子或分子的振动能量是量子化的，而且由于它们处于相互力场中，能量又是相互耦合的。在简谐近似下，由所有原子或分子组成的体系的总能量，可表示为许多能量相互独立的、无耦合的“粒子”能量的总和。这些粒子的能量也是量子化的，即称为声子。从简谐振动观点看，声子实质就是晶格振动或晶格波的一个简正模式。

在特超声领域中，特超声的产生、传播和检测，实际上都是声子与媒质中各种微观结构相互作用的结果。

液氦中的声波 sound wave in liquid helium 氦(He)具有两种同位素，^{4}He 和 ^{3}He。常压下，^{4}He 在 4.2K 时液化成液体，并且直至绝对零度都不固化。2.17K 时液态^{4}He 发生相变。相变温度以上称为 He I，相变温度以下称为 He II。He I 为通常液体，其中能传播的惟一声波模式就是通常的密度涨落波。He II 具有超流动性，可直观地描述成由超流成分和正常成分组成，其中能传播的声波模式有五种，分别称为第一声、第二声、第三声、第四声、第五声。液态^{3}He 中除五种声外，还可传播所谓的零声。液氦中多种声模式的存在是液氦量子效应的宏观表现。

第一声 first sound 是液氦中的一种声模式。这是在大块 He I 及 He II 中传播的密度涨落波，即压力波。

第二声 second sound 是 He II 中的一种声模式。若在 He II 没有总的质量迁移，但正常成分与超流成分可以有相对运动，而正常成分的运动导致能量与熵的转移，从而出现温度的波动，即温度波，称为第二声。

第三声 third sound 是 He II 中的一种声模式。在固体表面形成的 He II超流膜中，可传播类似于浅水中重力波的表面波，称为第三声。第三声中的恢复力是固体表面与膜之间的范德瓦尔斯力。

第四声 fourth sound 是 He II中的一种声模式。在超漏物质(多孔物质如粉末等)中注入 He II，由于超漏物质的孔隙尺寸小于正常成分的黏滞穿透深度，正常成分被锁定，超流成分仍可自由运动，从而在超流成分中可传播密度涨落波，这称为第四声。

第五声 fifth sound 是 He II 中的一种声模式。超漏中若维持压力不变，则可存在类似于第二声的温度涨落波，称为第五声。

零声 zero sound 是液态^{3}He 中的一种声模式。液态^{3}He 是费米子系统，在其中除可存在第一声至第五声外，还存在所谓无碰撞声，其中费米面的形变以声波形式传播，称为零声。零声又分纵波零声与横波零声。它们的唯象描述分别对应于通常流体中的纵声波与黏弹流体中的切变波。

五、电声学
Electroacoustics

电声学 electroacoustics 研究声电相互转换的原理和技术，以及声信号的接收、存储、加工、传递、测量、重放和应用的一门分支学科。研究内容覆盖所有的声波频率范围，从次声到特超声。但通常仅局限于可听声范围。

电声互易原理 electroacoustic reciprocity principle 对于线性、无源和可逆的电声换能器，用作声接收(例如，传声器)时的电压(或电流)灵敏度与用作发送时相应的电流(或电压)灵敏度之间的关系，按照互易原理它仅决定于换能器的几何形状、频率和媒质的物理性质。

电声互易原理常用于声压基准的建立和换能器灵敏度的校准。通过互易原理无需直接测量声压，而只要通过几何量、电学量和媒质的物理特性的测量就可以精确地得到声压值。

互易常数 reciprocity coefficient, reciprocity constant 在一给定频率下，对于互易的电声换能器，它的互易常数为用作声接收时的电压(或电流)灵敏度与用作声发送时的电流(或电压)灵敏度之比值；即

$$J = | M_V / S_I | = | M_I / S_V |$$

式中的 M_V 为接收电压灵敏度(V/Pa)，S_I 为发送电流灵敏度(Pa/A)，M_I 为接收电流灵敏度(A/Pa)，S_I 为发送电压灵敏度(Pa/V)。

互易常数又称为互易参量，它是声场的函数。例如，球面自由声场中，线性、可逆、无源换能器的互易参量为

$$J=\frac{2d}{\rho_0 f}$$

式中 ρ_0 为媒质密度（kg/m^3），f 为频率（Hz），d 为作发送用时，空间一点到换能器声中心的距离（m），应满足远场条件。

电声换能器 electroacoustic transducer 用于接收电（或声）的输入信号，并转换为声（或电）输出信号的器件，使输入信号的某些所需特征在输出信号中反映出来。

根据工作频段或使用条件的不同，有电声换能器、超声换能器和水声换能器等类别和名称。通常，电声换能器是指工作在音频范围内的换能器，如扬声器，传声器和耳机等。

换能器的互易校准 reciprocity calibration of transducer 根据电声互易原理校准换能器灵敏度的方法。因为通过互易原理，无需直接测量声压，而只要通过几何量、电学量和媒质的物理特性的测量就可以精确地得到声压值，从而获得换能器的灵敏度。故互易校准又称为绝对校准，它是换能器灵敏度校准方法中准确度最高的一种。

校准传声器的声压灵敏度常用耦合腔互易法（又称小室法）进行绝对校准。两只传声器之间用耦合腔（小室）进行耦合，根据互易原理进行校准。IEC 327（1971）标准中给出了对ϕ23.77mm电容传声器灵敏度绝对校准的总准确度，在低频和中频时为 0.05dB，到 10kHz 时为 0.1dB。

标准传声器的自由场灵敏度常根据互易原理在自由声场中进行绝对校准。IEC 486（1974）标准中给出了对ϕ 23.77mm电容传声器灵敏度绝对校准的总准确度，中频时约为 0.1dB，到 20 kHz 时为 0.2 dB。

机电声类比 mechano-electro-acoustical analogy 基于力学、电学和声学现象在物理本质和数学描述等方面的某些相似性，经过比较总结，提出的一种在不同学科领域进行类比的处理方法，从而彼此可以在现象描述、数学处理及结果理解等方面互相借鉴、延伸。典型例子之一是借用电路图的方法画出力学和声学类比等效电路图。

阻抗 impedance 在给定的频率下，动力学的场量（例如力，声压）与运动学的场量（例如振动速度，质点速度）之比值，或电压与电流之比值。

阻抗一般在线性系统和稳态正弦信号的条件下使用。在瞬态情况下，作为频率函数的阻抗是指各自的傅里叶变换或拉普拉斯变换之比。

阻抗一般是复数，其实部称为“阻”，其虚部称为“抗”。

阻抗的倒数称为导纳。

共轭阻抗 conjugate impedance 共轭阻抗是一对阻抗，它们的实部分量（阻）相等，虚部分量（抗）大小相等而符号相反。共轭阻抗可用共轭复数来表示。

力阻抗 mechanical impedance 在线性力学系统中某一点的力阻抗是指作用在这点上的力与在力的方向上总的速度分量之比值。如果所研究的对象受到的是扭曲力矩的作用，则扭曲力阻抗为力矩与在力矩方向上总的角速度分量之比值。

力阻抗一般为复数，它的实数部分称为“力阻”，它的虚部部分称为“力抗”。

力阻抗的倒数称为力导纳。

驱动点阻抗 driving-point impedance 系统中某一点的动力学场量（例如力，力矩，声压等）与该点的总的运动学场量（例如速度，角速度，体积速度等）之比值。

驱动点阻抗常用于换能器的分析中，在不同的条件下有不同的名称。例如：

当换能器的输出端与力阻抗为零的负载连接时，在换能器输入端呈现的驱动点阻抗称为自由阻抗；

当换能器的输出端与规定负载连接时，在换能器输入端呈现的驱动点阻抗称为加载阻抗。

当换能器的输出端与力阻抗为无限大的负载连接时，在换能器输入端呈现的驱动点阻抗称为受挡阻抗。

自由阻抗 free impedance 见“驱动点阻抗”。

加载阻抗 loaded impedance　见“驱动点阻抗”。

受挡阻抗 blocked impedance　见“驱动点阻抗”。

转移阻抗 transfer impedance　系统中某一点上的动力学场量(例如力,力矩,声压等)与该系统中另一点上的总的运动学场量(例如振动速度,角速度,质点速度等)之比值。

动生阻抗 motional impedance　电声换能器的动生阻抗等于它的加载电阻抗减去力学受挡时的电阻抗。

动生阻抗常用于磁回路耦合换能器,例如电动扬声器。

辐射阻抗 radiation impedance　振动物体辐射声波时因声场的反作用而产生的阻抗。

无限大障板上圆形平面活塞的辐射阻抗为

$$Z_r = R_r + \mathrm{j} X_r$$

$$R_r = \rho_0 c_0 \pi a^2 R_1(2ka)$$

$$X_r = \rho_0 c_0 \pi a^2 X_1(2ka)$$

式中:Z_r 为辐射阻抗,ρ_0 为空气的密度,c_0 为空气中的声速,a 为平面活塞的半径,$R_1(x)=\frac{x^2}{2\cdot4}-\frac{x^4}{2\cdot4^2\cdot6}+\frac{x^6}{2\cdot4^2\cdot4^2\cdot8}+\cdots$,$X_1(x)=\frac{4}{\pi}\left(\frac{x}{3}-\frac{x^3}{3^2\cdot5}+\frac{x^5}{3^2\cdot5^2\cdot7}-\cdots\right)$,$k$ 为波数。

阻抗圆 impedance circle diagram　换能器的阻抗是一个复数,它又是频率的函数。在复数平面上描述换能器的阻抗随频率变化的图形,当换能器的品质因数 Q 不太小时,在其共振频率附近一般呈圆形,称为阻抗圆。

声阻抗 acoustic impedance　媒质在波阵面某个面积上的声阻抗是这个面积上的声压与通过这个面积的体积速度的复数比值。单位是声欧($\mathrm{Pa\cdot s/m^3}$)。当考虑的是集总阻抗而不是分布阻抗时,某一部分媒质的声阻抗就是驱动这部分媒质的声压差与体积速度的复数比值。

声阻抗的实部常称“声阻”,其虚部称为“声抗”。

声阻 acoustic resistance　在声学系统中,由于空气的黏滞性、热传导等使声质量振动时产生阻尼,将声能转变为热能,这种起阻尼作用的元件称为“声阻”。也指声阻抗的实部。单位为帕秒每立方米($\mathrm{Pa\cdot s/m^3}$)。

声抗 acoustic reactance　声阻抗的虚数部分,单位为帕秒每立方米($\mathrm{Pa\cdot s/m^3}$)。

声质量 acoustic mass　在声学系统中抵抗体积速度变化的声学元件。元件的声质量数值定义为

$$M_\mathrm{a} = p\Big/\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}$$

式中 p 为驱动声压,$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}$ 为体积速度变化率,M_a 为声质量。

一个刚性管壁的短管,其半径与长度比波长小得多,管内空气近似同相位振动,这样的空气柱可认为是声质量元件。

声劲 acoustic stiffness　抵抗所加压力变化的声学元件。其定义为

$$p = S_\mathrm{a} X$$

其中 p 为声压,X 为体积位移,S_a 为声劲,单位为帕每立方米($\mathrm{Pa/m^3}$)。

声顺 acoustic compliance　声劲的倒数,也叫声容。单位为立方米每帕($\mathrm{m^3/Pa}$)。

一体积为 V,具有刚性壁的空腔,如其尺寸比波长小很多,则腔内压缩与膨胀近似为同相位,这样的空腔可认为是声顺元件,其值为

$$C_\mathrm{a} = V/\rho_0 c_0^2$$

式中 C_a 为声容,ρ_0 为空气密度,c_0 为空气中声速。

声导纳(Y_a) acoustic admittance　声阻抗的倒数,单位为立方米每帕秒($\mathrm{m^3/Pa\cdot s}$)。

声导(G_a) acoustic conductance　声导纳的实数部分,单位为立方米每帕秒($\mathrm{m^3/Pa\cdot s}$)。

声纳(B_a) acoustic susceptance　声导纳的虚数部分,单位为立方米每帕秒($\mathrm{m^3/Pa\cdot s}$)。

声阻抗率(Z_s) specific acoustic impedance　媒质中某一点的声压与质点速度的复数比值,单位为帕秒每米($\mathrm{Pa\cdot s/m}$)。

声阻率(R_s) specific acoustic resistance　声阻抗率的实数部分,单位为帕秒每米($\mathrm{Pa\cdot s/m}$)。

声抗率(X_s) specific acoustic reactance　声阻抗率的虚数部分,单位为帕秒每米($\mathrm{Pa\cdot s/}$

m)。

响应、灵敏度 response, sensitivity 换能器、仪器和系统输出端的指定量与输入端的另一指定量的比值。响应或灵敏度也可用“级”表示,但基准值必须说明。借助于响应或灵敏度的前缀词以指明输入或输出端具体的指定量。

声中心 acoustic center 声中心是指在发声器上或附近的一个点,在远处观测时,好像声波是从该点发出的球面发散声波。

频带声压级(L_{pf}) band sound pressure level 有限频带内的声压级。基准声压为 2×10^{-5} Pa。频带宽度必须指明,如频带宽度为1倍频程时,则称为倍频程声压级(Octave band sound pressure level),以此类推。

谱[密度]级 spectrum [density] level 信号在某一频率的谱密度与基准谱密度之比的以10为底的对数,单位为贝[尔](*B*)。但通常以分贝(dB)为单位。仅适用于所涉及频率范围内为连续谱的信号。谱级前应冠以适当物理量以说明其种类,如声压、速度等。

频程 frequency interval 声信号或其他信号所涉及的频率间隔,以上限频率与下限频率的比值的对数来表示,通常此对数以2为底,单位称为倍频程(oct)。有时此对数也可以10为底,此时单位称为10倍频程(decade)。例如以1000Hz为中心频率的倍频程,其上限频率为1414Hz,下限频率为707Hz。

传声器 microphone 用于接收声信号,通过声电换能而获得电信号输出的一种电声换能器。根据换能原理的不同,可分为:静电式、电动式、压电式、电磁式、磁致伸缩式、离子式、电子式和碳粒式等。按指向特性可分为:全向、单指向(心形、超心形等),双向和可变指向性传声器等。

常用的传声器有属于静电式的电容传声器和驻极体传声器,这类传声器是一种有源传声器,灵敏度高,频率响应平直;还有属于电动式的动圈传声器,是一种无源传声器,使用方便,可靠性好。

扬声器 loudspeaker 将电振荡信号转换成为声信号,并向周围媒质辐射声波的一种电声换能器。其分类方式类同于传声器。

由于扬声器的辐射特性与扬声器安装方式、声波的频率、有效辐射面积、振动系统的等效质量和顺性等诸因素有关,在音频范围内,低频段和中频段常选用锥形扬声器,高频频段常选用球顶形扬声器。将一个或多个不同频段辐射的扬声器,以及其他装置,例如分频器、滤波器等安装在同一箱子内组成扬声器系统,亦称音箱。

为了提高扬声器的辐射效率,常用号筒将扬声器的辐射部分与媒质耦合,使声阻抗得到匹配和获得指向效果,这种扬声器称为号筒扬声器。

耳机 earphone 将电信号通过换能获得声波,并与人耳紧密地声耦合的一种电声换能器。根据与人耳声耦合的不同,分成不同类型的耳机。例如,具有一个大得足以覆盖包括耳壳在内的腔体的耳机称为耳罩式耳机;紧贴在外耳上的耳机称为贴耳式耳机;放在外耳内,或一部分直接插入外耳道的耳机称为插入式耳机(又称耳塞机);通过管子耦合到双耳的耳机称为听诊式耳机等。

送话器 telephone transmitter 用于通讯系统中的传声器,一般分为通用送话器和抗噪送话器两类。通用送话器在一般环境中使用,分为有源和无源两种。抗噪送话器在环境噪声比较大的场合使用,根据工作原理不同可分为气导式和接触式两种。

受话器 telephone receiver 用于通讯系统中的耳机。一般分为有源和无源两类,常用的受话器有动圈式、静电式和电磁式等。

指向性图案 directivity pattern 换能器的灵敏度是入射或辐射声波的传播方向的函数,在规定的平面和规定的频率用图形曲线来描述称为指向性图案。

指向性图案常用极坐标来表示,在图案中包含声辐射最大值方向的波瓣,或包含接收到的声信号最大值方向的波瓣,称为主瓣。除主瓣以外的所有的波瓣称为旁瓣。

指向性因数 directivity factor 对于声发送用换能器,指向性因数是指在规定的频率下,在主轴上远处某一固定点的自由场声压的平方,与

用声功率相同、频率相同的点源代替后在同一点上所产生的声压的平方之比值。

对于声接收用换能器，指向性因数是指：在规定的频率沿主轴到达的声波的自由场灵敏度的平方，与频率相同，方均根声压相同的扩散场灵敏度的平方之比值。

这是一种用能量比值来描述换能器指向特性的方法。以同频率和同声功率的点源，或用同频率和同声压的扩散场为参考，换能器的指向性因数越大，则说明换能器的指向性越强。

指向性指数 directivity index　换能器的指向性指数是以 10 为底的指向性因数的对数，再乘以 10，单位为 dB。

主瓣 main lobe　见“指向性图案”。

录音 sound recording　把声能转换成其他形式的能量，并将信号加以记录或储存的技术。

录音主要有三种方式：机械录音，磁录音和光学录音。

机械录音是将声信号通过声电转换变成电信号以后，再经电声转换以机械形变的方式记录在载体上。例如，将电信号转变成振动，通过刻纹头将振动信号刻录在唱片上，形成唱片上的纹槽，将信号记录下来；或将电信号采样以后变成数码信号以控制激光的强度，在光敏材料上形成“坑”和“岛”的机械形变，将信号记录下来（即 CD 唱片）。

磁录音是将声信号转变成电信号以后，以剩磁的形式记录在载体上。例如，磁带录音机。

光录音是利用声音调制光束，使光敏载体（常用的是照相胶片）将光信号的变化记录下来。例如，电影胶带上图像旁边的光学条纹。

放音 sound reproduction, playback　使记录载体内的所有信号重新转换成声能后重放出来的技术，放音也称为还音或重放。根据记录信号的载体不同，主要可以分成三类：机械还音，磁还音和光学还音。

机械还音的设备主要有：电唱机和 CD 唱机等。它们通过拾音头或激光束拾取唱片上机械形变所携带的信息，并将它们转变成声能重放。

磁还音的设备主要有：磁带放音机，磁卡放音机和音频页放音机等。它们利用磁头拾取记录载体上的磁信号，并将它们转变成声能重放。

光还音的设备主要是光学放音机，用于电影系统。它包括光源、光学系统、光电池和走带机构，它把所录光信号转换为波形大致相同的电信号，然后以声波形式重放。

电子乐器 electronic music instrument　电子乐器是指完全用电子技术合成各种不同的音乐信号，以模拟各种不同的乐器，或获得不同的声效果，最终用扬声器系统重放的装置。

电子乐器的种类很多，例如电钢琴，电吉它，电子琴，音响效果器，MIDI 和电子合成器等。大部分采用数字音频合成技术和信号处理技术以产生各种不同的音色、节奏和效果，特别是计算机技术的应用，使得控制各种复杂参数成为可能，可以获得微妙逼真的音色以模拟各种乐器的演奏。

此外，电子乐器也有其本身的特色，例如，有丰富的谐音，可以产生颤音、“镶边”以及不同感受的音响效果等。

声频工程 audio engineering　泛指声信息的拾取、传输、记录或储存、合成、加工处理、重放和扩声，以及测量、控制系统的工程。例如通信系统，广播系统，声像记录和传输系统，扩声系统，会议声系统，播音室、录音棚的录放系统和家用高保真放声系统等。它广泛涉及电声学、建筑声学、信号处理技术、生理声学、心理声学、语言声学和音乐声学等学科知识的应用。

高保真系统 high fidelity system　能高质量地记录或重放原有音乐和语言信号的组合装置。它要求能如实地记录和重现原有声源的特征，因此对记录和重放设备的要求很高。鉴于目前的设备还不能完全达到高保真的要求，国际标准化组织 IEC 提出了高保真设备最低性能要求的系列标准（IEC581）作为高保真系统的考核依据。

扩声系统 sound reinforcement system　由扩声设备和声场组成。主要包括：声源和它周围的环境，把声信号转变为电信号的传声器，放大信号并对信号加工处理的设备和传输线，以及把电信号转变为声信号的扬声器系统和

听众区的声学环境等。

扩声效果的好坏，并不仅仅决定于扩声设备的质量，还与周围的环境有密切的关系。例如，一套好的扩声设备在一个混响时间过长的厅内使用，有可能出现语言听不清，音乐一片浑浊，没有层次感的效果。

立体声系统　stereophonic［sound］system　多个传声器、传输通道和扬声器系统或耳机按一定规律排列组成的系统。它根据人耳定位的机理产生和提供聆听者一个声源空间分布的感觉，以重现音乐或表演节目现场演出的效果。

立体声系统可以用于录音或广播，也可以用于重放系统或扩声系统。如：录音用立体声系统、广播用立体声系统和重放用立体声系统，以及扩声用立体声系统等。

调音台　mixing console　能够将多路传声器和其他节目源（例如录音机、CD 等）的输出电平独立的或组合的加以增强、减弱、修饰和加工处理的设备。

调音台主要有通道输入组件、母线输出组件、输出总控组件、信号指示系统以及对讲和检测信号等系统组成。

调音台是现代音响系统中必不可少的控制中心，是录音系统和扩声系统的核心部分，也是节目制作或音响效果再创造的必备设备。

媒体矩阵　media matrix　媒体矩阵是一种声频工程中的专业控制设备。它集数字音频技术、信号处理技术和计算机技术于一体，组成一个稳定的智能化控制中心，具有调节、控制、设计、组合运行和参量比较等功能。

它具有多路输入和输出通道，这些通道之间的任何一个声学参量（强度、频率、时间和相位等），以及通道之间的分配、组合均可以根据需要调节和控制。因输出与输入之间的关系犹如数学中的矩阵而得名。

该设备的虚拟数据设备库中存有各种不同的调音台、信号分配器、参数均衡器、分频器、延时器、混响效果器、激励器、压缩限幅器、扩展器、噪声门、解码器、接线分配器、输出选择器、信号发生器和测试系统等。它几乎包含了所有的音频信号处理和控制功能。

该设备特别适用于具有多路输入和输出，并要求多变的场合。例如，会议厅，多功能厅和多用途的比赛场地等。

噪声　noise　紊乱不定的或统计上随机的声音，有时人们把不希望的或不需要的声音，或其他干扰也称为噪声。

噪声在不同场合有不尽相同的含义。例如，对人类生活和社会环境产生影响的噪声是指多个不同位置的声源发出的噪声，常称为环境噪声。在对声信号进行检测时，有一种与声信号是否存在无关的，不需要的声音或干扰常称为背景噪声。在电声器件和电子仪器或设备中，因为电子的热运动或器件间的相互感应，外界干扰和信号的不对称等因素引起的不需要的信号也称为噪声。

噪声有时也可以为人们利用。例如在目标跟踪技术中，被动检测常利用目标产生的噪声来测定其方位和距离，以及利用设备发出的噪声信号对设备进行监控等。

无规噪声　random noise　瞬时值不能预先确定的声音。无规噪声的瞬时值对时间的分布服从于一定统计分布的规律，无规噪声在很宽的频率范围内具有连续的频谱，但是它的谱密度不一定均匀。

白噪声　white noise　瞬时值随机变化的一种噪声。其幅值对时间的分布满足正态分布。白噪声具有连续的噪声谱，包含有各种频率成分，其等带宽的能量是相等的，功率谱密度与频率无关，各频率的能量分布是均匀的。

白噪声常用作测试信号。“白”是从光谱学中借用过来的，意指这种噪声类同于白色光。

粉红噪声　pink noise　它与白噪声一样也是一种噪声信号。具有连续的噪声谱，包含有各种频率成分，不同之处在于其功率谱密度与频率成反比，即等比例带宽的能量相等。

粉红噪声是一种测试信号。电声器件接收或重放的语言和音乐都是随机信号，因此采用粉红噪声来替代纯音作为测试信号更为合适，此外，它的谱特性与人耳的听觉特性相类似，所以粉红噪声常用于电声器件的性能测试。“粉红”一词也是从光谱学中借用来的。

粉红噪声可以从白噪声源得到。只要将白

噪声通过相邻的两个倍频程带宽衰减 3dB 的滤波器即可得到粉红噪声。也就是说，在线性频率坐标中白噪声的输出是一条水平直线，而粉红噪声则是以每倍频程衰减 3 dB 的曲线。在对数频率坐标中粉红噪声的输出是一水平直线，而白噪声则是以每倍频程提升 3 dB 的曲线。粉红噪声相对于白噪声而言，它的低频成分比较多。

信噪比 signal to noise ratio 信号功率与无用的噪声功率之比。

在信号检测技术中，信噪比越大，意味着检测到目标越明显。在信号记录或重放技术中，信噪比越高，意味着记录或重放的信号越大，它也是音质评价中的一个重要指标。

数字音频压缩编码 digital audio coding with bit rate reduction 数字音频压缩编码是指利用人们的听觉特性，如听阈、空间/时间掩蔽效应以及方向感等，对数字声信息编码，以达到压缩比特率的目的。

数字音频压缩编码的方法大致可归为子带法和变换法两类。具有代表性的数字音频编码方法有 MPEG（moving pictures expert group）和国际编码标准采纳的 MPEG Layer Ⅰ（简化的 MUSICAM），MPEG Layer Ⅱ（MUSICAM）和 MPEG Layer Ⅲ（ASPEC）。

子带音频编码 sub-band audio coding 子带音频编码是对一定频带内的数字声信息，通过滤波器将其均匀分割成若干个子带，然后根据一定的模型对子带进行处理和编码的方法。例如，在数字盒式磁带录音机（DCC）中采用的 PASC 编码是一种精密自适应子带编码。它将整个输入信号经采样和数字滤波后分成 32 段等宽的子带，利用人耳对整个频段中各频率响应灵敏度不同的原理，使得用于编码的信号音域、音量适合人耳的听觉规律，故编码率大为提高。然后利用听觉掩蔽效应，使低于阈值的信号不予编码，遇到高强度信号则自动占用邻近的空码，使有限码得到充分利用，同时编码精度也获得提高。DCC 中数据传输速率为 384 kb/s。

变换音频编码 transform audio coding 变换音频编码是将声音样点变换到频域，按极限带宽对子带进行处理和编码。它在较低的比特时有明显的优势。例如，杜比 AC-2 音频编码是一种独立声道的变换编码算法，工作在每声道比特率为 64～192kb/s 条件下，采用极限带宽尺度，即将全频段按极限带宽划分为若干个不等的子带，对子带的包络和样点编码。考虑时域分辨率，编码器自适应控制样点块长度等。

杜比 AC-3 音频编码是 AC-2 的多声道扩展算法，它加入了一个前面中间声道，两个后面的环绕声道和一个低音效果声道，称为 5.1 声道或称为 3/2/0.1 配置，即有 5 个主声道（左声道 L，右声道 R，中心声道 C，左环绕 L_S 和右环绕 L_R）和 1 个低频效果（超低音）声道 LFF（0.1）组成。

六、超声学
Ultrasonics

超声学 ultrasonics 研究各种产生和接收超声波的方法和技术、超声波的传播特性、超声波与物质的相互作用以及超声在科研和生产领域的各种应用等的一门声学分支学科。由于超声应用的不断扩展和技术的进一步提高，超声学中又逐渐形成若干相当成熟且相对独立的领域，如水声学、光声学、医学超声、声表面波技术等。

声能学 sonics 超声学的一部分，研究超声各种应用的方法、技术及作用机理等。它又可分为两大类：利用超声波的能量来对物质材料进行加工处理的应用部分称为功率超声；利用超声波的能量来对材料或物体的性质、结构进行检查、测量的应用部分称为检测超声学。

功率超声 power ultrasonics 超声学中研究声能量对物质材料进行加工处理的方法、技术及作用机理的学科。

超声检测 ultrasonic detection 利用超声对凝聚态物质的成分、性质、参量和几何尺寸等进行检查测定的方法和技术。超声检测的应用范围很广，在工业上作为无损探伤手段来检查材料或构件内部的缺陷和伤痕，或用来测量

液位、流速、厚度、黏度及混合液组分等;在科学研究中,超声波被用来研究材料的微观结构、化学和生化过程等;在国防上用来研究海洋、探测鱼群、潜艇等水下目标并逐渐发展成为另一独立的分支学科——水声学;在医学上超声波用来诊断和治疗某些疾病,并已逐渐形成为另一独立分支学科——医学超声。

超声探伤 ultrasonic flaw detection 利用超声波来非破坏性地检查材料或机械部件的内部缺陷、裂痕的一种技术。其原理是当超声波在被检材料中传播时,如遇有缺陷或伤痕,传播特性就会发生变化,测出这些变化,就可确定其缺陷如裂纹、气泡、杂质等的存在及它们的形状、大小和分布状况等。超声探伤已在机械、冶金、建筑、水利及航天等许多工业部门得到越来越广泛的应用,特别是超声成像技术的应用更使超声探伤发展到能直观地观察缺陷的新阶段。

声传感器 sonic sensor 半无限大材料表面传播的表面声波,或压电薄板材料中的 Lamb 波等,由于受边界上力学、电学等边界条件的影响,传播特性也会发生改变,测出这些特性(主要是声速)的改变,即可检测出边界上力学参数例如微质量、应力、黏滞、温度等和电学参数(如介电常数)等的改变,这就是声传感器结合平面集成工艺制成的声传感器具有体积小、灵敏度高、造价低等优点,因而在物理、化学、环境监测、生化过程等的在线实时检测中具有很好的应用前景。

声发射 acoustic emission 固体在因某种应力产生的范性形变(破坏的早期)阶段,释放能量而产生弹性波的一种声波发射现象。它的频谱很宽,波形复杂,与材料的性能、所受应力情况等有关,因而根据声发射规律,可研究材料的破坏机理、破损发展趋势、抗断裂性能等,因而逐渐发展成为一种新的无损检测技术。

压电效应 piezoelectricity; piezoelectric effect 某些单晶材料如石英、铌酸锂等受外加应力时,由于其内部晶格结构的形变,使原来宏观表现的电中性状态被破坏而产生极化电场,这种现象称为压电效应。相反,当这类材料受到外加电场作用时,也会产生应力和应变,则称为逆压电效应。

某些多晶材料如压电陶瓷的电致伸缩效应与单晶材料的逆压电效应几乎完全一样,其逆电致伸缩效应类似于压电效应,故也包括在压电效应内。

声电效应 acousto-electric effect 半导体材料中,超声(或高频声子)与自由载流子的相互作用所产生的各种物理效应,例如声波的衰减或放大(声子的吸收或发射),超声对半导体电压、电流特性的影响以及电流饱和、声电振荡及声电畴等。

光弹效应 photoelastic effect 介质中应力波的存在可改变介质的介电常数或光折射率,因而影响光在介质中的传播特性的现象。

磁致伸缩 magnetostriction 某些磁性材料中的磁畴,在其自发磁化方向的长度可能与其他方向的不同。当有外加磁场时,磁畴会转动使其磁化方向尽量与外磁场一致,因而这种材料沿外磁场方向的长度就会发生变化,这种现象称为磁致伸缩现象。反之当材料受到应力或应变时,其磁化强度也发生变化,称为逆磁致伸缩效应。

电致伸缩 electrostriction 有些多晶材料如锆钛酸铅陶瓷等,存在着自发形成的分子集团即所谓电畴,它具有一定的极化,并且沿极化方向的长度往往与其他方向的不同。当有外加电场作用时,这种电畴就会发生转动,使其极化方向尽量转到与外电场方向一致,因此这种材料沿外电场方向的长度会发生变化,这种现象称为电致伸缩效应。反之,若使材料经受外加应力或应变,则其总极化强度也发生改变,称为逆电致伸缩效应,实用上往往称为压电效应。

磁声耦合 magnetoacoustic coupling 在外磁场影响下,磁性媒质中传播着电子自旋磁矩进动的自旋波,当外加磁场的强度适当,使它的频率与波长接近于媒质中声波的频率与波长时,磁矩的波动会导致晶格的波动,即产生声波。反之也可以因声波传播而激发起磁矩自旋波。这种自旋波与声波的耦合称为磁声耦合。

机电耦合 electromechanical coupling 机电

换能器所具有的机械能与电磁能相互耦合的现象。

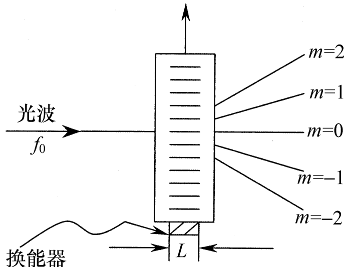
德拜-席尔斯效应 Debye-Sears effect 超声波对光的一种衍射效应。当光束穿过纵波声场时，由于声场中媒质的密度呈周期性疏密变化，从而使光的折射率也形成空间周期性变化，光束发生衍射。

拉曼-纳斯衍射 Raman-Nath diffraction 声光相互作用现象的一种。若光束传播方向与超声波传播方向相垂直，且声波波长较长，同时光通过声波时相互作用区的距离 L 满足下列关系

$$L \ll \frac{\Lambda^2}{\lambda}$$

式中 Λ 为声波波长，λ 为光波波长。这时在中央出射光点的两侧会对称地出现衍射谱，这种现象称为拉曼-纳斯衍射。

如光束与超声波传播方向不完全垂直，则出现的衍射谱是不对称的。



拉曼-纳斯衍射图

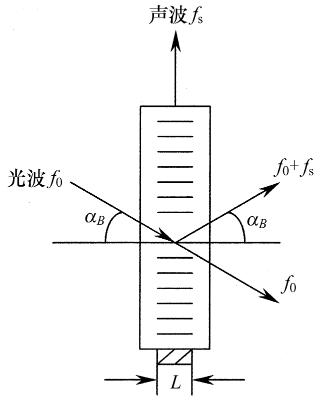
布拉格衍射 Bragg diffraction 声光相互作用现象的一种。如果超声波波长比较短，而且光通过声波时相互作用区的距离 L 满足下式

$$L \gg \frac{\Lambda^2}{\lambda}$$

式中 Λ 和 λ 分别为声波和光波的波长。这时若光束以倾斜角度通过声波，并且光束的方向与声波波阵面之间的夹角 α_B 满足下式

$$\Lambda \sin \alpha_B = \frac{1}{2}\lambda$$

则在非偏转的出射光线一侧，就会出现一级强衍射光，此一级强衍射光与声波波阵面之间的夹角也是 α_B，如图所示。这种现象称为布拉格衍射，而 α_B 称为布拉格衍射角。



布拉格衍射图

声成像 acoustical imaging 用声波照射物体时，将物体透射或反射出来的声波收集并记录下来，结合合适的信号处理技术以得到该物体的图像称为声成像。由于声波能在各种材料中传播，所以利用声成像技术可以获得各种材料，包括光学不透明物体内部结构的像。

把声像转变成可见像则常是依靠压电效应、声的化学效应、热效应及电子技术等手段。

声全息术 acoustical holography 将全息原理应用于声学领域而产生的一种新的声成像技术。用声波照射物体形成衍射图案，再用相干参考声波与之干涉，记录下被测物体声场的振幅和相位分布的全部信息，即声全息图。以后再用相干光照射该记录，便可显示出该物体的可见像。有时也可使这两个步骤同时进行而达到实时成像。

超声换能器 ultrasonic transducer 各种类型发射和接收超声波的器件的总称。就换能原理而言，超声换能器有的利用换能器材料的物理效应如压电效应、磁致伸缩、电致伸缩等；有的利用换能器结构中的电动力效应如电磁效应、静电效应；有的利用流体喷注时的涡漩振动以及结构的共振、调制等。此外，按换能器使用环境、工作频率、需求功率、不同用途等，可以采用各种结构形式。

超声显微镜 ultrasonic microscope 将声束

聚焦后在样品上扫描，由于样品内部各点声学性能的差异，利用声反射或透射的方法来产生高反差、高放大倍数的图像的一种声学成像装置。由于能传播超声波的媒质种类要比传光媒质多得多，所以用超声显微镜可观察到普通光学显微镜或电子显微镜所不能观察到的样品内部的微小结构，包括生物系统内部组织等。并且由于高频超声的波长很短，超声显微镜的分辨率较高。

超声马达 ultrasonic motor　利用压电或电致伸缩材料中的弹性波作为驱动源，直接推动可运动的部件产生直线或旋转运动的电-(声)力换能装置。它不像传统马达那样用电磁力驱动，因而不受电磁干扰，而且体积小，重量轻，在精密机械、自动控制等领域具有良好的应用前景。

超声陀螺 ultrasonic gyroscope　又名压电陀螺，是近二十余年来发展起来的一种新型振动惯性器件、其原理是在一根两端自由的金属棒上贴上压电片，输入电压使棒作恒幅振动，当棒沿纵轴有一角速度时便产生科里奥利力，使棒在垂直于振动的方向产生弯曲振动，其振动大小正比于角速度，再用压电片测出梁弯曲振动的大小即可获得角速度大小。此种陀螺按其振动体结构又可分为音叉型、振梁型、圆筒型、H型等。由于它没有传统机械陀螺的轴承磨损，故寿命长，抗冲击能力强，起动时间短，可靠性高，体积小，耗电少，而且在恶劣环境条件下有较好适应能力和很好的性能价格比，精密度可达中等。过去主要用于测量系统，目前已向控制领域推广。不仅用在民用，在军事系统和装备中也已成为不可缺少的关键部件。

超声电子学 ultrasonic electronics　研究固体介质中声表面波的产生、传播和接收，应用先进的半导体平面集成工艺，制作以声表面波为信号载体的电子学器件如延迟线、滤波器、振荡器、卷积器等的一门学科。由于声速比电磁波速度小五个数量级，所以超声电子学器件的特点是小型化、工作频率可高到数千兆赫，因而在通讯、雷达、信号处理及电子对抗中发挥了重大作用。

声表面波器件 surface acoustic wave device (SAWD)　是一种声学技术与电子技术相结合的信号处理电子器件。它是利用半导体平面工艺在压电材料基片表面制作出叉指状的金属电极(称作叉指换能器 IDT)，电极接上交变电压即可在基片表面激发出声表面波(SAW)，电信号可藉此声表面波传递。由于声表面波沿基片表面传播，信号很容易随时输入或输出，且在传播过程中即可进行信号处理如延时、滤波、存储等等；其次声表面波传播速度比电磁波小五个数量级，即对同样的频率，声表面波的波长比电磁波波长要小五个数量级，因此这类器件比电磁波器件小得多；第三由于这是一种模拟器件，其信号处理速度非常迅速，因而成为一类新的强有力的信号处理器件。这种器件创始于20世纪60年代中期，正是数字器件蓬勃发展，不少模拟器件被逐渐淘汰之时，但这类器件却由于上述一些特点反而不断地发展，已形成带通滤波器、延迟线、振荡器、谐振器、脉冲压缩滤波器、横向滤波器、卷积器、存储相关卷积器等等一系列器件，广泛应用于雷达、电子对抗、通信、电视等系统中。目前的发展方向，一是拓宽应用领域，如做成各类传感器；二是应通信的需要向高频发展，由于工艺条件的限制，目前大量生产的器件均在1000MHz以下，实验室中已研制出10GHz数量级的器件；三是与其他技术结合发展出各种混合器件，如与表面光波导相结合的表面声光器件，与半导体CCD器件相结合的声电荷转移器(ACT)等。

声电荷转移器 acoustic charge transfer (ACT)　这是一种将声表面波(SAW)技术与半导体技术相结合的新型模拟信号处理器件。其原理是利用声表面波在压电半导体中的行波势代替半导体器件CCD的时钟信号推动载流子随声表面波前进，从而将其频率提高到声表面波的超高频工作频段，同时又避免了影响提高SAW器件性能的各种二次效应，因而可使相应器件达到很高的性能指标，此外它还可兼有信号存储和可编程的功能，如可制成带通滤波器、色散延迟线、对各种编码的匹配滤波器、均衡器、符号发生器、可编程横向滤波器、

模拟微处理器等各种器件。它的出现将会大大提高雷达、通讯、电子对抗等系统的性能。

微机械超声器件 micro-mechanical ultrasonic devices 利用微电子工艺制作毫米/微米量级的微型机械电子零件及系统，称为微机电系统。在美国称为 micro-electro-mechanical system，简称 MEMS，是面向 21 世纪的新兴技术。

微机电系统是由电子和机械元件集成构成的独立智能系统。以超声波的产生、接收和传播作为传感和传动的媒介，是微机电系统的一个重要方面，如微型传声器和微型超声马达等，称为微机械超声器件。通常除了以硅基片为主要材料之外，压电、铁电材料、陶瓷和聚合物等材料及其薄膜是常用的材料。利用微米/纳米加工工艺制作的微型超声器件，具有体积小、重量轻、功耗低、灵敏度高、响应时间短，便于与其他微机电系统集成等优点。适用于狭窄管道中运作(如医学上人体血管检查)，航空航天应用，以及军事上的特殊应用，完成大尺寸超声器件所无法完成的任务。

超声医学 ultrasound in medicine 超声波理论和技术在医学各部门广泛应用并逐渐发展成为特有的“医学中的超声”或“超声医学”。基础方面包括超声在生物生理学、生物物理学、生物化学、微生物学等领域的应用；在临床医学中包括超声诊断、超声治疗、超声外科、超声成像等，尤其是超声成像技术现在已成为诊断疾病的极其普遍而重要的手段之一。

高强聚焦超声无创性外科 HIFU noninvasive surgery 20 世纪 90 年代初，国际上兴起了一种旨在用于治疗癌症的高强聚焦超声(high intensity focused ultrasound，HIFU)外科技术，亦称作无创性超声切除(noninvasive ultrasound ablation，NUA)或聚焦超声外科(focused ultrasound surgery，FUS)。该疗法的主要特点是，将频率为 1 MHz 附近的超声波束，在体外施以聚焦，借助于超声或磁共振成像设备的帮助，使焦点处高强超声准确定位到患者体内靶组织(如肿瘤)上，高强超声(可达几千、甚至上万 W/cm^2)短时间(0.5～5 s)的辐照即可使靶组织升温到 65℃以上，使蛋白质热固化，从而使靶组织坏死，同时又不损伤其周围的正常组织。

对于一个体积足够大的肿瘤组织，可通过成像设备获取其完整的三维容积信息，再在计算机软件控制下，使超声聚焦焦点对靶组织，从点到线、到面、再到整个体积进行三维扫描治疗。从而使整个瘤体原地固化，失去了增殖、浸润和转移能力。此后，机体再逐渐将其分解与吸收，达到消除与治愈肿瘤的目的。

HIFU 无创性外科技术的研究工作，在美、英、日、德等国都在积极开展并受到很大重视，且被誉为 21 世纪治疗癌症的高新医疗技术。我国重庆医科大学，在 HIFU 肿瘤治疗设备的开发研制及其临床应用方面已走在世界前列。

超声生物效应 ultrasonic bioeffect 适当剂量的超声波作用于生物体，使其状态、功能或结构产生影响或发生变化的效应。超声生物效应的研究对象遍及到生物体系的各个层次：分子级、细胞级、组织器官及生物整体，并从定性研究进入到定量研究，为超声医疗奠定基础，同时为安全诊断的剂量标准的制定提供必要的依据。

产生超声生物效应的物理机制有三种：热机制、机械机制、空化机制。一般认为声强小于 $10W/cm^2$、作用时间大于 1s 时，以热机制为主；声强为 $100～1000W/cm^2$ 时以机械机制为主；声强大于 $1000W/cm^2$、作用时间小于 ms 级时，则以空化机制为主。

超声振动使种子表皮松软，增强吸水率，加速新陈代谢过程，提高发芽率；超声能量可提高植物体内酶的活性，促进细胞分裂，加速植物的生长速度。用超声波处理种子和培植蔬菜的实验已取得很好的增产效果。

超声生物物理学 ultrasonic biophysics 这是研究超声波与生物媒质相互作用以及这些相互作用规律在生物、医学中应用的一门声学分支学科。其研究的主要内容有：超声波在生物媒质中的传播性质，即传播速度、吸收、散射、衰减以及非线性参量等；超声波与生物媒质的相互作用及作用的物理机制；在超声波作用下，生物体系的状态、功能及结构的变化，即超声生物效应；超声剂量学，即定量研究超声声场参数与超声生物效应之间的关系。

超声生物物理学的发展不仅为现代超声医

学(包括诊断与治疗)的迅速发展提供了必要的物理基础与数据,也为探讨与揭示反应速率在 10^{-3}～10ms 之间的生物大分子的动态变化提供了详细资料。

生物声学 biological acoustics 研究声波在生物媒质中传播的基本规律,声波与生物媒质相互作用产生的生物效应等。也研究某些动物特有的发声、听觉功能,例如某些动物可以接收到次声,从而可帮助早期预报地震、风暴等。

声化学 sonochemistry 研究利用超声空化产生的在极短时间内、局部区域里的高温和高压,来加速、控制化学反应过程,提高反应产率和诱发新的化学反应,它是一门新兴的,已引起国际化学界广泛兴趣的交叉学科。

七、光声学
Photoacoustics

光声学 photoacoustics 研究光声效应的机理,包括光和热、热和声的转换及传播的理论和技术。特别是 20 世纪 70 年代末以来,光声效应的应用迅速发展,利用光束在样品上扫描而记录下光声信号的振幅和相位,可得到样品表面或亚表面(在热扩散长度以内)的结构象,由此研制成各种类型的光声显微镜已非常成功地应用于金属、陶瓷及半导体器件等的无损检测和评估。近年激光超声的研究更使光声技术发展到一个新的水平,今天光声学已在物理、化学、生物和医学等许多领域的分析和检测方面得到广泛应用。

声光效应 acousto-optic effect 光通过处在超声波作用下的透明物质时产生的衍射现象。因为媒质在声波作用下密度会产生周期性疏密变化,形成相位变化的光栅,光栅常数就是声波波长。按实验情况来区分,它包括能产生多级衍射光谱的拉曼-纳斯衍射(或称德拜-席尔斯衍射)、能产生一级衍射光谱的布拉格衍射。声体波、声表面波及磁弹波对光束产生一级或多级的衍射现象。

声光效应在物理学与声学领域中已得到广泛应用,如用来测定多种材料常数(弹性常数、声速、声衰减、光弹、磁弹及磁光常数等),也可制成多种有用的声光器件如声光偏转器、声光 Q 开关等,用于光电子技术、光信息处理和集成光学技术中。

光声效应 photoacoustic effect 当光辐照到物体上时,由于物质对光的吸收,使物质内部形成局域的热源,并使物质膨胀,当光强受到调制时,即由物质的伸和缩而产生声波,这种效应称为光声效应。光声效应实际上是光热和热声两个效应的叠加,所以光声效应主要研究热的转换和传播及各种应用,并逐渐发展成为一门新的超声学分支——光声学。

光声谱仪 photoacoustic spectroscope 利用光声效应研制的光谱分析装置。当光源强度经周期性调制后照射于样品时,样品吸收光能通过光热效应转化为热能也称热波,再通过热声效应转化为同频率声能,一般利用与样品同安装于封闭光声盒中的传声器接收光声信号,即反映样品的吸收系数(无辐射跃迁部分),当光源波长扫描时,可测定样品的吸收光谱。光声谱技术对样品的特性、形状和尺寸无任何特殊要求,故广泛应用于气、液、固等各种状态物质的光谱分析,且特别适用于弱吸收物质的吸收光谱分析。

光声显微镜 photoacoustic microscope 利用光声效应研制的显微成像装置。激光束强度经周期性调制后,通过透镜聚焦于样品表面,在样品表面附近或内部激发声波。利用置于样品表面附近的传声器或黏附于样品背面的压电换能器接收声信号。当光点在样品表面扫描时,接收的声信号随空间变化,反映了样品的表面或亚表面的结构或性质的变化,即光声显微成像。由于热波能透入光不透明的固体,且热波为高衰减波,只能透入一个热波波长的距离(约为声波波长的 10^{-5}倍),因此光声显微镜特别适合于表面层的分层结构成像显示。

激光超声 laser ultrasonics 利用激光激发超声以实现超声检测的技术。由于是非接触和远距离激发和探测,因而可对高温、酸、碱等恶劣环境下的样品进行在线检测,加之脉冲宽度可窄到 ns(纳秒)甚至 ps(皮秒)数量级,检测

的空间和时间分辨率可大大提高，例如实验上已能以 nm(纳米)的空间分辨率测量超声衰减和速度，成为研究薄膜及微结构的有力工具。近年来激光超声的理论、技术和应用都获得了飞跃发展。

八、水声学 *Underwater Acoustics*

水声学 underwater acoustics 研究水下声波的产生、辐射、传播、接收和量度，并用以解决与水下目标探测及信息传输有关的各种问题的一门声学分支学科。在海水中声波的衰减远比电磁波为小，故声波是海水中探测目标和传递信息的有效工具，因而水声学的发展对提高现代海军的反潜作战能力起着重要作用。同时水声学在民用如导航、海底地质考察和石油勘探、渔业方面均有着广泛的应用。

声呐 sonar “声呐”是 sonar 的音译，它是英语中“声导航和测距”的略语(sound navigation and ranging)，是利用声波对水下目标进行探测、定位、跟踪、识别，用于通信、导航、制导、武器的射击指挥和探测对抗等方面的水声设备。

声呐在军事上是舰艇的水下耳目，用它对敌舰进行搜索、跟踪、识别和测距以便实施攻击。同时用声呐进行探雷、测深、测速以完成导航任务并保证安全。在民用事业上如船舶导航、探鱼、海底地质勘测和海洋学研究等，声呐也得到广泛的应用。

主动声呐 active sonar 是用于探测水下目标，并测定其距离、方位、航速、航向等运动要素的一种设备。它由声呐发射某种探测信号，该信号在水中传播的路径上遇到障碍物或目标，反射回来到达发射点被接收，由于目标信息保存在被目标反射回来的回波之中，所以可根据接收到的回波信号来判断目标的参量。该声呐能精确测定目标距离，可探测固定目标。其隐蔽性差，作用距离较近，存在混响干扰。

被动声呐 passive sonar 是用接收基阵搜索海区内目标发出的噪声，并以此来测定目标距离、方位和性质的设备，用作警戒或测距。该声呐隐蔽性好，能较准确地判断目标性质。近代被动测距声呐除能测向外，还能测距，但无法测定静止目标的距离。

收发合置声呐 monostatic sonar 用同一只换能器来发射和接收声音的声呐设备。

声呐方程 sonar equation 工程上要合理设计一声呐系统，或在使用过程中要确切的预报某一声呐系统的性能，都必须把声呐系统的设备性能、信道影响、目标特性等作为一个整体综合起来加以考虑。工程上根据一定准则，利用一个基本方程来定量地反映它们三者之间的数量关系，这个基本方程即称之为“声呐方程”。它是水声工程设计和水声设备合理使用的有效工具，并被认为是水声中两大分支——水声物理和水声工程之间的桥梁。

声呐参数 sonar parameter 声呐方程中的每一项都可称之为“声呐参数”，将这些参数加以分类，可分为三类：由声呐设备本身所决定的参数；由信道介质所决定的参数；由目标所决定的参数(声源级 SL，传播损失 TL，目标强度 TS，噪声级 NL，接收指向性指数 DI，混响级 RL，检测阈 DT)。

回声信号级 echo level 属声呐参数的组合名称 $SL-2TL+TS$，在水中用水听器测得的回声强度。

噪声掩蔽级 noise-masking level 属声呐参数的组合名称 $NL-DI+DT$，在噪声掩蔽下的最小可检测回声级。

混响掩蔽级 reverberation masking level 属声呐参数的组合名称 $RL+DT$，在混响掩蔽下的最小可检测回声级。

回声余量 echo excess 属声呐参数的组合名称 $SL-2TL+TS-(NL-DI+DT)$。

当回声余量为零时，在规定 DT 阈的概率条件下检测刚好实现。

品质因素 performance figure 属声呐参数的组合名称 $SL-(NL-DI)$，在换能器端测得的声源级和噪声级之差。

优质因素 figure of merit 属声呐参数的组合名称 $SL-(NL-DI+DT)$，在被动声呐中，等于允许的最大单程传播损失，在主动声呐

中，在 TS＝0dB 时，等于允许的最大双程传播损失。

作用距离预报 range prediction 它是声呐预报中的一种，它按已给定的声呐系统的性能，再根据给定的时间和海区的具体传播条件、环境噪声、目标特性等参数，运用声呐方程预先估算设备的作用距离，以便合理使用设备。

声道 sound channel 将声源放在声速极小值水层附近，它所射出的某些声线，会先后受到上层负梯度的折射，以及下层正梯度的折射，致使声线返回到声速极小值水层附近而向远处传播。声源所辐射的部分能量被限制在某一水层之间。具有这种水文条件的介质称为声道。

深海声道 deep ocean sound channel 几乎所有的深海区，在不同的深度处都存在着一个声速的最小值水层，声源所辐射的部分能量被限制在某一水层之间，尤其是在深海的条件下，辐射的某些声线将不会受到海面和海底反射的损耗，使传播损失更小，所以把这种情况称为声道传播，而声速极小值水层称为声道轴。由于上述声道在深海条件形成的，故称为深海声道。地理概念上，常将海深大于 200m 的海区称为深海。

浅海声道 shallow water sound channel 当声波在其中传播至远处时，声波经受海面和海底多次反射，水层的上下边界对传播将发生影响，即声波被限制在声道的上下边界之间传播。从地理概念上，水深小于 200m 的海区统称浅海。而从声学概念上讲，常把 $Hk<10$ 的情况作浅海处理（H 为水深，k 为传播信号的波数）。

声速剖面 velocity profile 是指声速随深度的变化，或声速-深度函数关系。以垂直轴表示海深，横轴以一定的比例表示声速。典型的深海声速剖面由三层组成，即表面层（或称混合层），主跃层，深海等温层。

线性分层介质 linear layered medium 所谓线性分层介质是指每一层中介质的声速与海深是线性变化关系 $c(z)=c_0(1\pm az)$，a 为相对梯度，c_0 是海面处的声速。

混合层 mixed layer 即为表面层，由于处在海表面，受日照、风雨、浪潮对流影响比较激烈，往往形成一层等温层即温度均匀不变，其深度可达几十米。声速主要取决于随海深增加的压力，故声速可能出现微弱的增加，形成微弱的声速正梯度。而且还常常受到季节气候的严重影响。

主跃层 main thermocline 在表面层以下往往会出现温度激烈变化（减低）的水层，即产生温度跃变，故称为主跃层。这时声速主要受温度控制，由于主跃层离海面较深，不受日照等影响，相对比较稳定，便出现声速随温度降低而减小，即出现负主跃层。

深海等温层 deep isothermal layer 在主跃层以下直至海底，一般是等温层，温度在 5℃左右，声速随着压力的增加而提升，出现正声速梯度。在负主跃层和深海等温层之间会出现一个声速最小的水层。

内波 internal wave 内波是海洋中的自然波，它沿着不同密度的水域分界面，有像表面波一样的传播的波动过程。它的产生与主跃层的温度波动有关，主要是由于温度的突变而形成。主跃层在强烈的风、潮汐、海流等驱动之下，产生温度波动，就形成在海洋介质内部的一种波动过程，称为内波。主跃层的温度波是内波的一种指示，也是测量内波效应的简便方法。内波的周期一般从 5min 变化到 15min，也有周期长达 30min 和 30min 以上的成分。

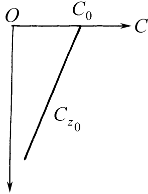
海洋混响 marine reverberation 声波传播过程中，由起伏海面、不平整海底及海水介质内部大量随机不均匀体上的散射在接收点所产生的声信号。海洋混响分为三大类即体积混响，海面混响，海底混响。

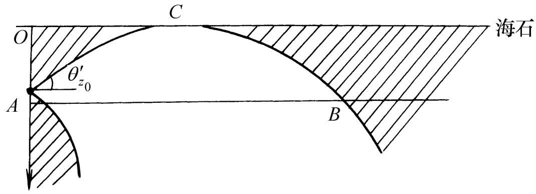
简正波理论 normal-mode theory 它用叫做简正波的特征函数来描述声传播，每一个特征函数都是波动方程的解，简正波叠加起来以满足边界条件和声源条件。其结果是一复杂的数学函数，特别适合于描述浅海中的声传播。

射线理论 ray theory 描述声场是由射线来传递声能量的，从声源出发的射线按一定的路径行走而到达接收点，其声场是所有到达射线的叠加结果。相应地有一定的到达时间和相位；每根射线管携带的能量守恒即射线强度由

射线管的截面变化而确定。由此在射线声学的范围内有两个基本方程：一个用以确定射线行走规律的程函方程；一个用以确定单根射线强度的方程。

极限声线 limiting ray 如图所示：声源以某一射出角 θ'_{z_0} 发射出一根声线，此声线在一定距离上正好和海面相切于 C 点，使得射出角大于 θ'_{z_0} 的声线无法超越 $A-C-B$ 区以外，由此称具有射出角 θ'_{z_0} 的这根声线称为“极限声线”。





极限声线图

声影区 shadow zone 从[极限声线]图中得知，声线无法到达 BC 区以外。按射线观点看，这个区域不受声线的照射，是一声的“暗区”，称为声影区，是负梯度影区。

漏声系数 leakage coefficient 如[极限声线]图所示的负梯度影区，并非是声音的绝对暗区。由于海表面散射和声能量通过基底泄漏到影区，结果使影区也有一很微弱的声场分布，说明层中能量不断衰减。即用漏声系数来描述，单位为 dB/km。

扩展损耗 spreading loss 假定介质是理想的，即无吸收、均匀、无边界的，这时所遇到的能量损失完全是由于波阵面的扩展而造成的，称为扩展损耗。

球面扩展损耗 spherical spreading loss 球面波的波阵面扩展损耗和距离 r 的关系有如下规律 $\mathrm{TL}=20\lg r$，即反平方定律，称之为球面扩展损耗。

柱面扩展损耗 cylindrical spreading loss 柱面波的波阵面扩展损耗和距离 r 的关系具如下规律：$\mathrm{TL}=10\lg r$，即反一次方定律，称之为柱面扩展损耗。

多路传播效应 multipath transmission effect 用简正波的语言来说，即声场的各简正波具有不同的群速度；用射线语言来说，则是到达接收点有不同路径的声线。

信号起伏 signal fluctuation 由于海水介质的不均匀性及边界的不均匀性随时间的随机变化，或者由于声呐系统目标的运动等原因，使得声呐接收到的信号的振幅和相位随时间发生随机变化。

会聚区 convergence zone 从深海声道的声线图得知，由于邻近声线的交会，所形成的包络称为焦散线。它是一个典型的声线会聚图像，这个区域由于声线密度很高，因而声能量在这个区域有聚焦作用，成为高声强分布区，被称为会聚区或会聚带。

会聚增益 convergence gain 为了从数量上描述会聚效果，引进“聚焦因子”概念，它是描述声波在非均匀介质中传播时，相对于在均匀介质中传播时其能量的发射和聚集程度的物理量，$F(r,z)=\dfrac{I(r,z)}{I_0(r,z)}$，那么对聚焦因子取对数并乘以 10 倍得到以分贝为单位的会聚增益 G_f，$G_f=10\lg F(r,z)=10\lg\dfrac{I(r,z)}{I_0(r,z)}$。

虚源 image source 在分析由位于有界面（如海面和海底）的介质中的声源所激发的声场时，为在界面上满足边界条件，可以想像在声源相对于界面的对称点上存在一系列虚源，它们与声源保持由界面的反射系数决定的幅度关系和相位关系。在介质中任意一点的声场可以表示为声源发出的直达波和无限的虚源系列所辐射的波之和，在界面上的边界条件即可得到满足。

声速梯度 sound velocity gradient 海水中声速随深度的相对变化率（即单位深度内声速的

相对变化量)，单位为 s^{-1}。若以海面为深度的原点，当声速随深度而增加时，称为“正梯度”，这时声线向上折射；当声速随深度而减小时，称为“负梯度”，这时声线向下折射。

声线图 ray diagram 由声源发出的若干声线所组成的图像。它可直观地表示在一定声速分布情况下的声能传输情况。在声线出射角间隔相等的声线图中，声线密的地方表示那里声能强，声线稀的地方则表示那里声能弱。根据声线图能定量地估计出声呐作用距离。

深水散射层 deep scattering layer (DSL) 海洋中有多层结构，其中栖息着一定密度的生物群等，有强烈的声散射作用。这些散射层的共振频率范围大致在 5～20kHz，散射强度大约 −70～−80dB。深水散射层随着不同的时间，甚至随着日出日落而变化。在所有的海洋中都有深水散射层，最浅在 60m 处也出现过。

W.K.B 近似 W.K.B. approximation 在非均匀介质中寻求波动方程近似解的一种方法。它突破严格求解波动方程可解类型的有限性，提供解的明晰物理图像。其基本思想是将非均匀介质分成许多薄层，每一层为均匀介质，声波在其中传播时，忽略在各个界面上的反射。波动方程解设为 $\varphi(Z)=A(Z)e^{i\varphi(Z)}$，$Z$ 是介质分界面法线方向坐标。$A(Z)$ 为幅度，$\varphi(Z)$ 为相位。其适用范围：(1)缓变介质(相对于波长)，(2)不在反转区，在反转区需对 W.K.B 解进行解析延拓。W.K.B 近似解是波动方程严格解的一级近似。

海洋环境噪声 sea ambient noise 又称“自然噪声”或“海洋噪声”，指海洋本身的噪声。按照发声的机理可将其声源分为水动力噪声、海洋生物噪声、海洋中的人为噪声、海洋热噪声、雨噪声等五类。

海洋环境噪声通常构成对声呐工作的重要干扰背景。

舰船辐射噪声 ship radiated noise 是声呐的主要目标——舰船、潜艇、鱼雷等所辐射的噪声之总称，被动声呐系统正是利用这种特性来检测目标的。其声源有三类：机械噪声、螺旋桨噪声、水动力噪声。其噪声谱包括连续谱和线谱，由于螺旋桨的周期转动，使得舰船辐射噪声成为一周期性非平稳的随机过程。

船舶螺旋桨噪声 ship propeller noise 是指船舶在水中航行时螺旋桨转动所产生的噪声。其声源是转动的螺旋桨引起的空化噪声，它是舰船噪声谱高频段的主要部分。调制的螺旋桨噪声称为唱音，它是一连续谱，主要集中在低频端并有周期性的峰值。螺旋桨的运动在水中引起湍流，它的辐射能量频谱也主要集中在低频端。这种噪声性质提供了识别目标的依据，同时也是主要的自噪声源。(尤其是高航速时)

船舶机械噪声 ship mechanical noise 指舰船的许多不同部件的机械振动所产生的噪声。这种振动通过各种途径从振动部件传到船体，而振动的船体则向水中辐射噪声。其声源包括齿轮、电枢槽等的重复的不连续性、不平衡的旋转部件；内燃机汽缸的周期性点火爆炸；泵、管道、阀门中流体的空化和湍流，凝气和排气；轴和轴承之间的机械摩擦等。前三种声源产生线谱，后两种产生连续谱噪声。它亦是自噪声的来源之一。(尤其是低速时)

自噪声 self noise 装在舰艇、声呐浮标和其他各种船只上的水听器不可避免地会接收到由于这些装载体以及声呐设备本身所产生的噪声，这种噪声即称为自噪声。它与水听器的指向性、安装方式及其在船上的位置关系很大。它是舰用声呐的一个重要干扰背景，降低自噪声是提高声呐作用距离的途径之一。

自噪声可分为本舰噪声和设备噪声两类。一般本舰噪声比设备噪声严重得多。

水动力噪声 hydrodynamic noise 不规则的和起伏的水流流过运动船只而产生的噪声。水流会激励船体的一些部分(包括螺旋桨)发生振动而产生噪声，作为黏滞流体的水流经船体表面所产生的流噪声也是水动力噪声的一种。流噪声在辐射噪声中起的作用大。水动力噪声是高速下的主要自噪声源。在特殊情况下，水动力噪声在线谱出现范围成为主要噪声源。

空化噪声 cavitation noise 在螺旋桨的周边附近产生涡流以及高声强的发射情况下，水流产生局部压力的降低，从而出现空化，当空化

气泡破裂时,会产生脉冲式的噪声,即所谓“空化噪声”,它有连续谱。对于任何高速的舰船,空化往往是主要的噪声源。发生空化现象后,发射器表面会被腐蚀,引起声功率损失,指向性图变坏。

尾流 wake 水面舰艇航行时,由于螺旋桨的转动,在水中引起一个泡沫区域。在这区域中水的运动具有涡流和湍流的性质,此区域称为尾流(习惯称为航迹),尾流延续的长度超过舰长许多倍。它是一种干扰,对声能有吸收作用,为隐蔽自己提供了有利条件。

水声换能器 underwater acoustic transducer 用以在水中发射或接收声波的换能器。在功能上与雷达的天线相似,需要有一定的灵敏度和指向性,有时还需排成阵列。水声换能器可以收发合置或收发分置。它在国防或民用事业上有广泛的应用。

发射换能器 transmitting transducer 简称“发射器”(projector),用于水中发射声波的换能器。它需能承受足够的功率,具有较高的电声转换效率和机械强度,它通常工作在谐振频率附近的一个适当宽的频率范围内。主要性能参数有:工作频率、带宽、发射功率、电声效率、谐振频率段的阻抗和指向性等。

接收换能器 receiving transducer 又称“水听器”(hydrophone),将水中声信号转换成电信号的换能器,它一般应具有较高的灵敏度,大多数都工作在共振频率以下一个相当宽的频带内,因此在其工作频段内要求有平坦的灵敏度频率响应。其主要性能参数有:工作频段,灵敏度和指向性等。

水声换能器基阵 underwater transducer array 它是由若干个换能器(称为阵元)按照一定的规律排列而成。其目的是为了在空间得到所希望的波束图案。

基阵通常可分为发射基阵和接收基阵两大类,其波束形成原理基本上一样,功能各有所异。其种类繁多,按阵元的空间排列区分,有:线列阵、平面阵、圆柱阵、球阵、体积阵、共形阵等;按基阵的波束形成方式区分,有:相控阵、乘积阵、自适应阵等。

声参量发射阵 parametric acoustic transmitting array 又称“声参量发射器”。方向相同波束重叠的两个声波在介质中传播时,由于介质的非线性性质,它们发生相互作用,并在相互作用内产生了新的辐射源,向介质中重新辐射和频波与差频波,这种现象称为声学的参量现象。由于介质对声波的吸收是高频大低频小,和频波传播衰减快,因而在介质中实际上只有差频波在传播,这种用小尺寸换能器产生尖锐指向性低频声场的虚源端射阵称为声参量发射阵,它解决了水声中希望获得尖锐指向性低频声场与换能器尺寸庞大的矛盾,付出的代价是换能效率较低。

自适应基阵 adaptive array 指利用自适应波束形成技术来形成波束的基阵。所谓自适应波束形成是指阵的指向性图案能够随着外界声场的变化而变化,以接收某个方向来的信号,而最大限度地抑制其他方向来的干扰噪声。其基本理论是维纳最佳线性过滤理论。

相控阵 phased array 即相位补偿(或延时补偿)基阵,它既可用以接收,也可用以发射。其工作原理是对按一定规律排列的基阵阵元的信号均加以适当的移相(或延时)以获得阵波束的偏转,在不同方位上同时进行相位(或延时)补偿,即可获得多波束。

其优点是,不必用机械转动基阵就可在所要观察的空间范围内实现波束的电扫描,非常方便灵活。同时,基阵的尺寸便可做得大一些以提高空间增益。

拖曳线列阵 towed line array 这是一种将换能器连成一串放在水中一定深度由舰艇拖曳的线列阵。它是一种非刚性阵,阵形在水中不可保持一条严格的直线,而是时间与空间的随机函数,由于其自身的线度不受载体的影响而可做得很长,获取空间增益大并受舰艇噪声影响小,因而大大提高水下检测及跟踪远目标的能力,认为是20世纪80年代以来水声技术的重大突破。

乘积阵 multiplicative arrays 是指将一个基阵人为地分为两部分或几部分,先将每一部分基元所接收到的信号进行线性相加,然后将它们各部分的总和,通过接收系统的电路进行非线性的处理,亦即相乘,最后从输出端获得一

个指向特性很好的乘积信号。其优点是:(1)在不增大基阵尺寸的情况下,可获得较尖锐的波束图;(2)它能在主波瓣束宽度变窄的同时,又适当地抑制旁瓣,从而提高乘积阵的定向精度。其缺点是接收电路变得相当复杂,信号功率增益略有降低。

阵增益 array gain 指水听器阵从噪声背景下检测信号时,相对于单个水听器检测时信噪比改善程度的一种量度。这种改善是由于基阵具有指向性,能抑制与信号方向不同的噪声而获得的。其定义为当阵的主波束对准信号方向时,阵的信噪比和单个阵元的信噪比之比,单位为分贝。对于各向同性均匀噪声场中的单向信号来说,其值与指向性指数相同。

在许多情况下,阵增益与相关处理中的空间增益是一致的,并和信号场、噪声场的相关系数有关。

导流罩 dome 在声呐换能器外面装一流线型的罩子,就可大大地减小水面舰船的水动力噪声。这种罩子就称为声呐导流罩。其要求导流罩必须是透声的;做得充分地流线化;有足够大的机械强度。

数字多波束阵 DIMUS array(digital multi-beam steering array) 在声呐中实现宽带多波束形成的最方便办法是采用数字形成技术。常用的是将信号限幅或以比特量化信号,用移位寄存器代替延迟线进行延时,这就是数字多波束阵。工作动态范围大,瞬时幅度归一化,适宜于数字处理是其突出的优点,虽增益略有损失,主要缺点是多目标分辨能力差。

水声信号处理 underwater acoustic signal processing 由于海洋中存在着噪声和混响干扰,要提高声呐探测作用距离,就必须提高从干扰背景中检测信号的能力,这样在水声学中就出现了水声信号处理分支。现在广泛应用统计决策论、信息论等理论,以及各种数字信号处理技术对发射和接收信号进行技术处理,从而达到提高水声通信的质量、可靠性及保密性的目的。这些数字信号处理技术包括:空间处理(波束形成等);时间处理(时域、频域);动态范围压缩;脉冲压缩;快速傅里叶变换;相关接收;匹配滤波;自适应波束形成;目标识别;自动检测和参数估计等。

相关接收 correlation reception 利用信号与噪声相关特性的差异(包括时间相关特性及空间相关特性),对接收到的信号加噪声波形进行相关运算,以获得信噪比的改善。用这种接收方法可从噪声干扰背景中检测出微弱信号,达到提高声呐作用距离的目的。

声呐目标识别 sonar target recogniction 指区分水中各种声呐目标的类型和性质的方法和功能。它通常由测量、数据预处理、特征选择和提取、分类运算和判决等主要环节组成,其理论基础是统计模式识别理论,其实现手段主要是计算机技术。

主动声呐是根据目标回波信号的各种特征来识别目标的;被动声呐则利用目标辐射噪声的多种特性来区分目标类型。

敌我识别是声呐目标识别的一个方面,用应答器的装置来识别。

检测阈 detection threshold 声呐站能否可靠和正常的工作,还取决于接收系统的检测信号的能力,为了在数量上反映出这种性能可用检测阈 DT 来表示。其定义可粗略地理解为:当观察者在预定的检测概率之下,刚能够可靠地判决目标存在时,在接收机输入端的信噪比,称为在预定概率判据下的检测阈,它的表示式为 $DT=10\log\frac{S}{N}$。式中 S 为接受系统输入端接收带宽内的信号功率;N 为接收系统输入端在带宽内的噪声平均功率。一个接收系统的检测阈愈低,接收系统的性能越好,抗干扰的能力愈强。

检测概率 detection probability 当接收机输入端确实有信号时,由于干扰背景等原因,可能作出两种判决:“有信号”或“无信号”。当有信号时,作出“有信号”的正确判决的概率称为检测概率,常用符号 P(D)表示。其决定于信号和噪声的特性、接收机的特性以及设置的阈值。

虚警概率 false alarm probability 接收机输入端事实上没有信号存在,却作出“有信号”的错误判决的概率,常用符号 P(FA)表示。它和信号、噪声的特性、接收机的特性以及设置的

阈值有关。

检测指数 detection index 从纯噪声和信号加噪声(均为高斯分布)的幅度概率密度曲线中知道:噪声的平均幅度是 $\bar{A}(N)$,信号加噪声的平均幅度是 $\bar{A}(S+N)$,方差都为 σ^2,则检测指数 d 定义为:两个平均值之差的平方与概率密度函数的方差之比

$$d=\frac{\left[\bar{A}(S+N)-\bar{A}(N)\right]^2}{\sigma^2}$$

d 是接收机工作特性曲线族的参数,相当于声呐处理器的输出信噪比,d 越大表示信号越容易被检测到。

似然比 likelihood ratio 两个条件概率密度函数之比。其中一个是信号加噪声的 $p(y|S+N)$,另一个是只有噪声的 $p(y|N)$。y 代表声呐系统的输出变量,检测的判决是根据它而作出的。似然比表示为

$$L_r(y)=\frac{p(y\mid S+N)}{p(y\mid N)}$$

就信号检测,即根据接收到的波形判断信号是否存在而言,似然比是充分统计量,即在接收到的波形中信号是否存在的全部信息,均包含在似然比这个物理量中。

声浮标 sonobuoy 声浮标是飞机投放的小型声呐装置。用作水下听测或回声定位。靠飞机投放的特殊包装的炸药,则能进行爆炸回声定位,此时声浮标用来接收回波和发射信号。

水声通信 underwater acoustic communication;underwater acoustic telemetry 以声波作为信息载体在水下传输指令、数据或图像。由于在水中声波比电磁波衰减慢得多,因而可以传得很远,所以水声通信是水下通信的主要手段。

声场匹配方法 matched field processing (MFP) 是现代海洋声学与计算机技术相结合的产物,对被动测距领域是新的突破。匹配场被动定位技术是将待测目标参数作为待估参数,计算目标在不同距离及深度下的声场分布,然后将这些声场数据与接收点处的实际声场数据进行拷贝相关,相关性最大的点即实际目标所处的位置。为了获得接收点处目标声源所产生的实际声场数据,一般用长的水平或垂直线列阵对海洋声场进行空间、时间取样。

要使匹配场达到实用,需克服计算花费时间长、海洋的声学环境参数较难掌握、噪声干扰、长线列阵使用不便等主要障碍。

目标运动分析方法 target motion analysis (TMA) 该方法是20世纪70年代以来广为研究被动测距的一种方法,出现了众多的目标运动分析算法,归纳起来可分为两类:一类是仅考虑把目标的方位作为测量值,然后对目标运动状态进行分析的算法,称为仅方位跟踪(BOT);另外一类算法是将目标的方位和频率作为测量值同时加以考虑,对目标运动状态进行分析,该方法不能对目标进行逐点的位置测量,因为它要求目标与测量船间有相对运动,它是对这种运动状态的估计,它不要求精确掌握信道的各个参数,对测量基阵的形状无特别要求,其算法更容易付诸实施,有利于对现有声场进行分析。

九、建筑声学 Architectural Acoustics

建筑声学 architectural acoustics 研究建筑物中和广场内声学问题的一门分支学科。既研究封闭空间内声波传播的规律,也探讨音质评价的主观、客观参量,同时也研究建筑材料的声学特性和噪声控制等问题。主要涉及选择建筑物位置、布置建筑物内部房间、设计房间形状和大小、选择和布置吸收和反射材料以及隔声、隔振等降噪设计,以保证室内声音传播的最佳条件,最终目的是达到满意的语言清晰度和音乐的音质。

室内声学 room acoustics 建筑声学的一部分,研究室内声场和房间音质问题。室内声场与自由声场的主要区别是增加了反射声,改变了频率传输特性,增加了声场能量密度以及改变了声场分布,因而形成了房间特有的声学响应,并影响了房间内听音的质量。

描述房间内声学特征的主要内容有:稳态声源在室内发声时声能的增涨,稳态声压级的分

布以及声源停止发声后声能的衰减;脉冲声源发声后室内各点接收到脉冲反射声的时空序列并由此引出一系列与室内音质有关的参量。

直达声场 direct sound field 声源在有界空间内辐射声波时,接收点除了接收到从声源直接传播到达的声波外,还接收到从各界面反射一次和多次的反射声波。声源附近直达声能量大于总的反射声能量的区域称直达声场。

混响声场 reverberation field 有两种含义:①指扩散声场;②指声源在室内稳定地辐射声波时,室内声场中离声源较远处反射声和散射声能量大于直达声能量的区域。

扩散声场 diffuse sound field 指满足下述条件的声场:①空间各点声能密度均匀;②从各方向到达某一点的声能量流的概率相同;③由各方向到达某点的声波的相位是无规的。

在实际房间中,完全扩散是不可能的,但墙面的不规则或室内障碍物引起的声散射会改进声场扩散程度。

半自由[声]场 semi-free[sound]field 一个反射面上(前)方的自由声场。例如在开阔的硬地面上方,紧贴地面的声源向地面上方的半空间辐射声波;又如在五个面接近全吸收,一个面全反射的“半消声室”内,声源贴着反射面放置时,室内就是该反射面上(前)方的自由声场。

混响时间 reverberation time 声音已达到稳态后声源停止发声,平均声能密度自原始值衰变到其百万分之一(60dB)所需要的时间,单位为秒(s)。常用的混响时间公式为

$$T_{60}=\frac{0.163\,V}{\bar{\alpha}S}$$

其中 T_{60}为混响时间,单位为秒(s),S 为房间内表面总面积(m^2),V 为房间体积(m^3),$\bar{\alpha}$ 为平均吸声系数。此式即赛宾(W.C.Sabine)混响时间公式,由赛宾在1900年提出,从而开始了建筑声学的研究。

临界距离 critical distance 声源在室内稳定地辐射声波时,在某一方向上直达声能量密度与混响声能量密度相等的点到声源中心的距离,也称扩散场距离。当声源辐射指向性为球形时,各方向的临界距离相等,这时也称混响半径。

扩散场距离 diffuse field distance 见“临界距离”。

房间常数 room constant 与房间大小和室内吸声总量有关的一个参数 R:

$$R=S\bar{\alpha}/(1-\bar{\alpha})$$

式中 S 为房间总的内表面积,$\bar{\alpha}$ 为该室内表面积的平均赛宾吸声系数。

房间常数是以统计声学方法处理室内声场时的一个重要参数。

吸声材料 sound absorbing material 吸声系数比较高的建筑材料都可以作为吸声材料使用。吸声系数很高的材料则要求材料内部充满连通的细孔,如各种纤维状的材料(玻璃纤维、矿棉纤维、棉麻丝绒织物、金属纤维等等),海绵状材料(气孔连通的泡沫塑料)等,称为多孔性吸声材料。吸声性能与材料的各种物理参数、几何参数有关。多孔性材料的吸声特性都是低频差、高频好。材料越厚,低频吸声系数越大,但由于材料的阻尼特性,使材料达到一定厚度后,吸声性能不再提高。

为了弥补多孔性吸声材料低频吸声系数小的特点,可以用多种共振吸声结构来平衡音质设计中不同频段所需的吸声量。共振吸声结构可以是薄板共振、薄膜共振,使用得较多的是刚性界面前四分之一波长处放置薄层多孔性吸声织物以及基于亥姆霍兹(Helmholtz)共鸣器原理的穿孔板共振吸声结构。

赛宾吸声系数 Sabine coefficient 用赛宾混响时间公式,测量房间内放入吸声材料前后混响时间的变化,计算出因吸声材料放入而增加的吸声量,再除以材料面积而得到的吸声系数。

赛宾吸声系数表示声波对材料漫入射情况下的平均吸声系数。

哈斯效应 Haas effect 反射声相对于直达声的延迟时间对语言可懂度的效应。短的延迟时间,反射声会增加直达声的响度,长的延迟时间导致可懂度降低,其间有个“临界延迟差”,它与反射声的强度、声源的频谱以及所在空间的混响时间有关。

在厅堂音质设计中,根据哈斯效应,必须避

免有延迟时间长于 50ms 的反射声使产生有害的回声。

早期侧向反射声 early lateral reflective sound 厅堂内观众席上来自两侧的比直达声延迟 80ms 以内的反射声。

根据一批音乐厅演出效果的调查、测试，以及实验室中模拟不同方向、延迟时间的反射声对音质影响的听感实验，结果表明早期侧向反射声可使听众在音乐演出时有置身于音乐之中的“空间感”或“环绕感”，这是获得良好音质的重要条件之一。

染色效应 coloration 某些反射声和直达声叠加时，引起原来声音的某些频率成分被增强某些频率成分被减弱而使音质变差的现象。

厅堂音质评价 evaluation of acoustical quality on auditorium 会议厅、电影院、剧院、音乐厅等等各类厅堂的声学质量，可以用仪器测量厅堂内一系列声学参数进行客观物理量的评价；而人们的主观听感评价则是厅堂音质的最终评价。

不同功能的厅堂对客观物理量的参数要求不同。对于传播语言为主的厅堂，如报告厅，则以语言可懂度为主，同时需要有好的自然度。在物理评价量方面，主要是混响时间，此外有声场的均匀性，座位上的响度（声压级）等；避免出现如回声、颤动回声、声聚焦等不利的反射声。

对于传播音乐为主的厅堂，如音乐厅、歌剧院，则有较多的主观听感的评价量，且不同专家还有评价量多少或侧重点不同的差别。兹将主要的主观听感评价量及其相对应的物理量的描述简述如下：

主观评价量	客观评价量
亲切感（intimacy）	t_1：第一个反射声比直达声的延迟时间，20～30ms 左右
明晰度（clarity）	$C_{80}=10\lg\left[\int_0^{0.08}p^2(t)\mathrm{d}t\Big/\int_{0.08}^{\infty}p^2(t)\mathrm{d}t\right]$，80ms 前后的声能比在 ±2dB 之内为好
温暖感（warmth）	125Hz 和 250Hz 的混响时间与 500Hz 和 1000Hz 的混响时间之比在 1.1 至 1.45 之间
活跃度（liveness）	高于 350Hz 的混响时间要足够长（不同节目类型有不同要求）
响度（loudness）力度（strength）	声场力度 $G=10\lg\left[\int_0^{t_2}p^2(t)\mathrm{d}t\Big/\int_0^{t_2}p_A^2(t)\mathrm{d}t\right]$，座位上的声能量与自由场中 10m 处声能量之比，4～5.5dB
空间感（spaciouness）	早期侧向反射声系数 $L.F.=\int_{0.005}^{0.08}p_L^2(t)\mathrm{d}t\Big/\int_0^{\infty}p^2(t)\mathrm{d}t$，用 ∞ 字形传声器接收到 80ms 内声能与总声能之比，0.2 左右为好
舞台支持（stage support）	$ST1=10\lg\left[\int_{0.02}^{0.1}p^2(t)\mathrm{d}t\Big/\int_0^{0.01}p^2(t)\mathrm{d}t\right]$，舞台上距声源 1m 远处 100ms 以内声能与直达声能之比，−12dB 以上为好

厅堂音质设计 design of acoustical quality on auditorium 包括室内音质设计和噪声控制两个方面。在确定厅堂的建设地址以及主要功能和座位数后，在建筑师初步建筑设计的基础上，根据主要物理评价量的优选值，进行诸如为达到最佳混响时间所需吸声量的计算以及吸声材料的布置；为使声场均匀，并有好的空间感和好的舞台支持，而对厅堂内部形状和反射面、扩散体的布置；为避免各种不利反射声的处理等等。噪声控制要考虑周围环境传来的噪声和振动的影响以及厅堂内部各种设备产生的噪声和振动的影响。

为了做好厅堂音质设计，对于要求高的厅堂，有时还进行计算机音质模拟分析和缩尺模型实验以及“可听化”模拟实验等辅助设计。

厅堂扩声系统有时也包括在厅堂音质设计范围之内。

语言可懂度 speech intelligibility 一个或几个发音人所说的语言单位，通过传输系统（各种通信系统和厅堂）后被一个或几个听音人所确认的百分数。当语言单位间的上下文关系对决定听者辨认不占重要地位时，常称为语言清晰度，如语音（元音、辅音）清晰度、音节清晰度等；如果上下文在语意上有关连，可以通过理解来帮助辨别时，常称为语言可懂度，如词可懂度（有时也称清晰度）、句可懂度等。

一个传输系统的清晰度或可懂度除了与传输系统的性能有关外，还与发音材料、发音人、听音人的情况以及测试方法有关。

混响室 reverberation room 音频声学特殊实验室之一。混响室六个界面均由吸声系数极小的材料构成，长、宽、高三个边长避免呈简单整数比，并有使声场充分扩散的设计，使室内除邻近声源处以及边界面附近外都达到近似扩散声场的条件，从而可以进行需要扩散声场条件的声学实验。

应用混响室可以测量建筑材料的漫入射吸声系数；在混响室内可以测量声源辐射的声功率；利用混响室内扩散声场条件可以进行换能器的扩散场灵敏度测量等。

消声室 anechoic room 音频声学特殊实验室之一。房间六个界面均安装高吸声特性的材料层，一般要求此吸声结构层的吸声系数能达 0.99 以上。吸声结构的吸声系数达 0.99 的下限频率称低截止频率。同时房间要有适当的隔声和隔振设计，使室内本底噪声达到工作所需的要求。在这样的房间内，声源辐射的声波的传播好像在自由空间中传播一样，既无边界面的反射，也无外界噪声和振动的干扰，所以“消声室”是模拟自由声场的实验室。消声室内声场与真实自由声场的偏差量，由界面吸声系数、房间大小和离声源的距离三个因素决定。

在消声室内可以进行电声器件电声参数的测量、声源辐射特性的测量以及各种需要自由声场条件的实验分析。

如果房间五个面都是强吸声界面，一面是反射面，形成一个反射面前方的半自由声场。这样的实验室称半消声室。

十、环境声学
Environmental Acoustics

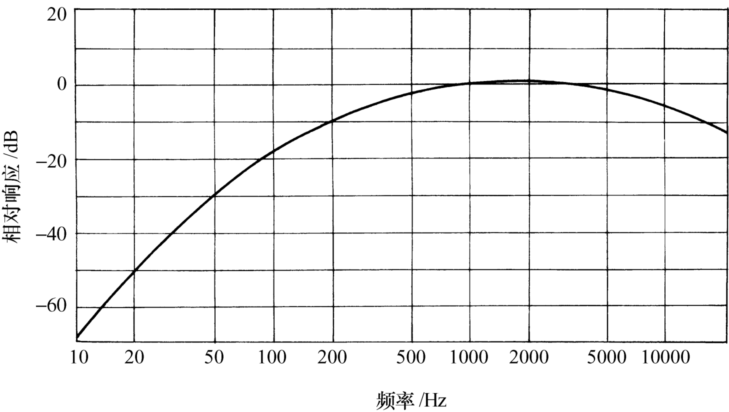
环境声学 environmental acoustics 研究室内外声学环境及其同人类活动相互作用的一门分支学科。包括声源的分析和识别，声波在各种情况下的传播规律，良好的听音环境，噪声（包括次声和振动）对人的效应，环境噪声的测量、评价及允许标准，噪声、振动的治理技术等。环境声学不仅涉及科学和技术问题，也涉及环境保护政策和法规问题，其最终目标是为人类生活和工作创造一个舒适良好的声学环境。

环境噪声 environmental noise 在人们生活、工作、学习、休息的场所，由周围各种类型声源传过来的总的噪声。

按社会功能来划分，通常有交通噪声、工业噪声、建筑施工噪声、社会生活噪声（包括商业噪声）等。环境噪声达到一定强度，便会影响人的工作、学习、休息。噪声污染与水污染、空气污染、固体废弃物污染一并成为当今社会的四大公害。

为了保护环境，我国制订并修改了《城市区域环境噪声》的国家标准（GB 3096—1993）：

类　　别	评价量 L_{Aeq}/dB	
	昼　　间	夜　　间
0　(疗养区,高级住宅区)	50	40
1　(以居住、文教机关为主的区域)	55	45
2　(居住、商业、工业混杂区)	60	50
3　(工业区)	65	55
4　(交通干道两侧区域)	70	55



A–计权曲线

噪声级　noise level　在环境噪声评价中,考虑人对于声音强弱的感觉与频率有关,因此在测量噪声大小时采用一定频率计权特性的仪器,例如声级计,通过A计权曲线(它大约是40方等响曲线规整化后的倒置形状)测量得到的声压级称A计权声压级,简称A声级,记为dB(A),是最常用的一种噪声级,是噪声的基本评价量。

声级计　sound level meter　专门用于测量声音大小的仪器,可以测量声音的瞬时声压级、A计权声压级、等效连续A计权声压级以及其他噪声评价量。国家标准GB 3785规定了声级计的电声性能及测试方法。

等效[连续A计权]声压级　equivalent [continuous A-weighted] sound pressure level　在某个 $T=t_2-t_1$ 的时段内,以一连续稳态的A计权声压级 $L_{Aeq,T}$,来表示在此时段内A计权声压随时间变化,但在能量上相等的噪声评价量,全称为等效连续A计权声压级,简称为等效声级:

$$L_{Aeq,T}=10\lg\left[\frac{1}{t_2-t_1}\int_{t_1}^{t_2}\frac{p_A^2(t)}{p_0^2}\mathrm{d}t\right]$$

式中 $p_A(t)$是A计权声压,单位Pa; p_0 是基准声压,20μPa。由于环境噪声多为非稳态噪声,所以等效声级在环境噪声评价中是一个重要的评价量。

环境噪声评价　evaluation of environmental noise　环境噪声评价是环境评价的一部分。

环境评价分为环境质量评价和环境影响评价。环境质量评价主要是对环境现状进行评价。例如在某一居民生活小区,按规定的方法进行噪声测量调查,可以知道该小区的环境噪声是否达到有关标准的情况,从而了解该小区

的声环境质量。

环境影响评价主要是对建设项目环境影响的预测评价。噪声环境影响评价的主要基本技术和方法是:建设项目周围被评价范围内的环境噪声现状和该范围内的区域环境噪声标准;掌握建设项目中各种噪声源的声学参数;从噪声源辐射的噪声向周围传播和衰减的计算(有理论计算、与已有类同项目的实地检测作类比、模型试验三种方法),最后作出建设项目对环境影响的预测评价,包括对建设项目中已有噪声控制的有效性作出评价,给出结论和建议。

噪声控制　noise control　研究获得适当噪声环境的科学技术。所谓适当,是指技术上、要求上、经济上是合理的,综合考虑是可以接受的。噪声控制技术通常采用吸声、隔声、隔振、减振等方法,使各种环境下的噪声低于有关噪声限值标准。

吸声降噪　noise reduction by sound absorbing　以增加吸声量的方法降低室内噪声级的技术。

根据室内声场分析,某处声压级的大小由从声源传来的直达声和由诸界面传来的反射声(称混响声)两部分来决定。如室内(一般在壁面和天花板上)增加吸声材料,则混响声能量将显著降低。虽然在离声源较近的以直达声为主的区域,声压级降低极小,但在以混响声为主的区域,声压级可明显降低。如果原来室内各界面的平均吸声系数为 α_1,增加吸声材料后的平均吸声系数为 α_2,则在混响声为主的区域内的声压级减低量 ΔL 为

$$\Delta L \approx 10\lg \frac{\alpha_2(1-\alpha_1)}{\alpha_1(1-\alpha_2)}$$

隔声　sound insulation　选用传声损失足够大的材料或结构封闭噪声源,这就是用隔声的方法来控制噪声。

要解决相邻两室的隔声问题,除了对间壁的传声损失有一定要求外,还要考虑声波通过门、窗的传播以及通过建筑结构的固体传声的影响。有些情况不宜依靠简单地增加间壁的单位面积质量来提高传声损失,例如民航客机的座舱、楼层上不宜增加很大重量时的隔声设计,需要采用轻结构多层隔声结构来提高间壁的传声损失。

传声损失　(sound) transmission loss　声波入射到无限大隔层时,入射声强度级与透射声强度级之差,称传声损失。它是反映“无限大”隔层的隔声性能的参数。

有限大面积的墙或间壁,因受边缘条件的影响,同样的隔层结构,其两侧的声级差可能有所不同,这时称之为该墙或间壁的隔声量。

质量定律　mass law　建筑隔层传声损失的基本定律,它表述为:建筑隔层传声损失与其面密度和频率乘积的以 10 为底的对数成正比。此定律表明:面密度增加一倍,传声损失大 6dB;频率提高一倍,传声损失也大 6dB。

吻合效应　coincidence effect　当声波以某入射角从空气向一隔层传播时,考虑隔层的弹性,会激发隔层内弯曲波的传播。如果声波到达隔层的时间顺序与弯曲波在隔层内传播的速度相“吻合”,使弯曲波的振动达到一极大值,向另一面的辐射也特别大,使传声损失大为降低,这一现象称吻合效应。产生吻合效应的频率 f_c 为

$$f_c = \frac{c_0^2}{2\pi\sin^2\theta}\left[\frac{12\rho(1-\sigma^2)}{Eh^2}\right]^{1/2}$$

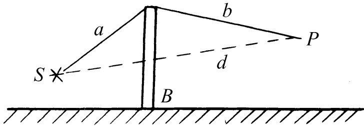
式中 c_0 为自由空气中的声速,θ 为声波入射角,ρ 为隔层材料的密度,σ 为材料泊松比,E 为材料的杨氏模量,h 为材料(隔层)厚度。当声波垂直入射时 $f_c \to \infty$,即不产生吻合效应;当声波掠入射时,$\sin\theta \to 1$,得到最低的吻合频率,称临界频率 f_{c0}。

声屏障　sound barrier　在噪声源 S 与受声点 P 之间,建立一不透气的有较大传声损失值的屏障 B,使声源辐射的噪声不是直接传播到受声点,而是经过屏障的绕射才传播到受声点,从而降低了受声点的声压级。

若无声屏障时的直线传播距离为 d,有屏障(屏障长度远大于屏障高度)时绕射传播的最短距离为$(a+b)$,声波的波长为 λ,则因屏障绕射因素使受声点声压级降低的分贝数 ΔL 可近似为

$$\Delta L \approx 13 + 10\lg N \quad (N = 1 \sim 10)$$

N 称菲涅耳(Fresnel)数，$N=\frac{2}{\lambda}(a+b-d)$。



振动控制 vibration control　采用隔振技术来降低振动的传递率；用振动阻尼减弱物体振动强度并减低向空间的声辐射；用动态吸振器将机械的振动能量转移并消耗在附加的振动系统上等技术称为振动控制。

在噪声控制工程中，振动控制技术是一个重要方面。有些精密机械、精密仪表以及要求低噪声的实验室，也需要振动控制来避免环境振动对它们的影响。

消声器 muffler，silencer　对于同时具有噪声传播的气流管道，可以用附有吸声衬里的管道及弯头或利用截面积突然改变及其他声阻抗不连续的管道等降噪器件，使管道内噪声得到衰减或反射回去。前者称为阻性消声器，后者称为抗性消声器，也有阻抗复合式的消声器。消声器的降噪性能有很大的频率依赖性。

设计消声器时需同时考虑消声器对气流的阻力而引起管道中的压力损失。

将有源消声技术应用于管道消声，它在管道中的低频噪声抑制方面有较好的应用前景。

有源消声(振) active noise (vibration cancellation)　拾取噪声(振动)源的信息，再用信号处理技术和特殊的电声器件，在一定的空间范围内产生与原来噪声(振动)幅值相等而位相相反的次级噪声(振动)来使其相互抵消。

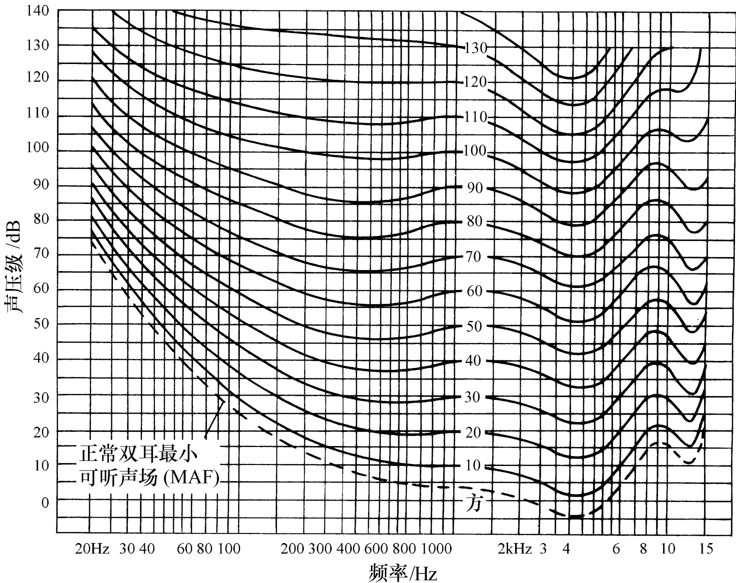
对于随机噪声，要实现有源消声的难度很大。在管道内、局部空间的低频噪声，已有实际应用的例子。

有源消声(振)也称主动消声(振)。

十一、生理声学
Physiological Acoustics

生理声学 physiological acoustics　研究发声器官和听觉器官的声学问题的一门声学分支学科。

音调 pitch　听觉判断声音高低的一种属性。



等响曲线

根据音调可以把声音按高低排列成音阶，它反映人耳对声音频率的感受。低频率的声音，音调低；高频率的声音，音调高。但音调与频率不成正比关系，它还与声压及波形有关。音调的单位是“美”(mel)。

响度 loudness 听觉判断声音强弱的属性。根据响度可以把声音排成由轻到响的序列。人耳感觉的响度主要决定于声音的强度，但与声音的频率和波形也有关。响度的单位是“宋”(sone)。

响度级 loudness level 以强度级表示的声音的响度。声音的响度级等于等响的1000赫纯音的声压级，单位为“方”(phon)。

等响曲线 equal-loudness contour 典型听音者感觉响度相同的纯音的声压级与频率关系的曲线。上页图示双耳测听的等响曲线，最低一条虚线即纯音最小可听声场——双耳测听的听阈曲线。

听阈 hearing threshold 在规定条件下，以一规定的信号进行的多次重复试验中，对一定百分数的受试者能正确地判别所给信号的最低声压即听阈。测量时应说明信号的特性、它传给听音人的方式和测量声压的地点。等响曲线中最低一条、与刚能被听到的1000Hz纯音响度级相同的曲线就是听阈曲线，它是纯音的最低可听声压的频率响应。

痛阈 threshold of pain 对于某一听者，刺激耳朵达到一定痛感觉的指定声音的最低声压级。不同人的痛阈有较大的差异，其声强级的范围约为125～140 dB。

听力损失 hearing loss 对于受损的耳朵和指定的信号，该耳朵的听阈超过规定的标准听阈的分贝数。

标准听阈是大量的年龄在18～25岁的，在耳科学上正常的听者的听阈的众数值。

听力损失与周围环境(生活环境和工作环境)的影响和年龄的增长有关。随年龄的增长，听力损失增大，特别是高频段的听力损失增大属正常情况。长期受到职业噪声或受到过度的声音刺激，例如，织布车间，迪斯科舞厅或聆听耳机发出的高声级的节目信号等而导致的听力损失属非正常听力损伤。由长期从事某项工作导致平均听力损失达25dB以上者称职业性耳聋。

双耳定位 binaural localization 双耳定位是双耳听觉所具有的判断声源方位的属性。声源相对于听音者在不同的位置发声时，声波到达听者两耳的强度和时间不同，听觉系统根据这些信息可以确定声源的位置。

对于低频声，人耳主要根据声波到达两耳的时间差来定位。对于高频声，由于人头对声波的散射作用，使声波到达两耳的强度不同，这是人耳定位的主要依据。人耳对声音的水平方位辨别率高，对垂直方位的辨别率低。

掩蔽效应 masking effect 一个声音的听阈因另一个掩蔽声音的存在而上升的现象。这是由于听觉的非线性引起的，是心理声学中很重要的一个效应。

一个纯音信号引起的掩蔽，大体上决定于它的强度和频率，低频声能有效地掩蔽高频声，但高频声对低频声的掩蔽作用不大。

噪声对节目信号掩蔽和节目信号的不同频带之间的掩蔽对重放系统的音质评价和音频信号的传输和记录中的压缩编码等有重要的意义。

心理声学 psychological acoustics 研究声音的主观感觉和客观物理量之间关系的一门声学分支学科。

十二、语言声学
Speech Acoustics

语言声学 speech acoustics 研究语言的形、声、意的关系和应用的一门声学分支学科。研究范围包括语音的发音过程和机理、语言的物理性质、语言的感知、语言的处理、语音通信的质量和效率以及特殊条件下的语言通信等问题。此外它还研究机器自动识别和理解语言及语言和文字的相互转换等问题。

语言合成 speech synthesis 用人工方法模拟人类发音器官的功能以产生语言的方法，合成的根据是语音单元的特征参数和发音规则，通常激励波由白噪声发生器和三角波发生器

组成,再经过一系列模拟口腔和鼻腔调制功能的滤波器,最后由扬声器重放出合成语言。

语言识别 speech recognition 指用机器对语言信号进行分析,根据语音单位例如音素、音节或单词的特征参数和语法规则,甚至包括语音之间文意的规律性加以逻辑判断来识别语言的过程。

语图 sonagram 将某一时刻的语言声分析为强度-频率关系即该时刻语言的频谱,语声频谱随时间的变化即动态频谱图称语图。

耳声发射 otoacoustic emission 产生于耳蜗、经过听骨链及鼓膜传导、释放于外耳道的声能。可表现为诱发耳声发射(evoked OAE)和自发耳声发射(spontaneous OAE)。

音乐声学 musical acoustics 研究乐律和乐器的一门声学分支学科,也包括听众对乐音的感知和反应等。

Electromagnetism
电磁学

电磁学 electromagnetism 电磁学是经典物理学的一个分支,是研究宏观电磁现象的基本规律和应用的学科。电磁学研究的主要内容包括:静电场、导体和电介质、稳恒磁场、磁介质、电磁感应、直流电路、交流电路、电磁波的产生和传播等。电磁学着重讨论电荷、电流产生电场、磁场的规律,电场和磁场的相互联系,电磁场对电荷、电流的作用,电磁场与物质相互作用的规律及产生的各种效应,交、直流电路的基本规律和计算方法等。电磁现象是自然界中普遍存在的一种现象,它不仅与人们的日常生活密切相关,而且几乎涉及科学技术的各个领域,因此可以说,电磁学是自然科学和技术领域中各门学科的重要基础。

一、静电场
Electrostatic Field

电荷 electric charge 电荷是基本粒子的一种固有属性,它不能存在于粒子之外,但又是独立存在的。电荷是一个基本概念,只能通过其存在的后果来描述。电荷有正、负两种。把用丝绸摩擦过的玻璃棒带的电叫做正电,用毛皮摩擦过的封蜡棒带的电叫做负电。同种电荷互相排斥,异种电荷互相吸引。电荷的量值只能取分立的值,任何带电体所带的电量总是基本电荷电量 e($e=1.60217733(49)\times10^{-19}$C)的整数倍,电荷的这种性质称为电荷的量子化。现代物理认为夸克带有 $\pm e/3$ 和 $\pm 2e/3$ 的电荷,即存在分数电荷。即使实验验证了夸克的存在,电荷仍然是量子化的。电荷的另一个重要性质是:不管在宏观尺度上还是微观尺度上,电荷总是守恒的(见"电荷守恒定律")。

点电荷 point charge 点电荷是一种物理模型。当相互作用的两个带电体的线度远小于它们之间的距离时,带电体的形状及其电荷的空间分布状况对相互作用的影响已无关紧要,这时,可以把带电体抽象成一个几何点,即点电荷。相反,线度很小的两个电荷相互作用时,如果它们之间的距离和电荷的线度可以比拟,那么,这两个电荷不能看做点电荷。

自由电荷 free charge 能自由移动的电荷叫自由电荷。导体内部存在大量自由电荷。金属导体中的自由电荷是自由电子;电解液中的自由电荷是离解的正、负离子;电离气体中的自由电荷也是正、负离子,而气体中的负离子往往是电子。

束缚电荷 bound charge 在电介质中,绝大部分电荷都不能像导体中的自由电荷那样自由移动,它们处于束缚状态,只能在一个原子或分子的范围内作微小的位移,这种处于束缚状态的电荷叫束缚电荷。

基本电荷 elementary charge 电荷是量子化的,迄今为止的实验证明,电荷的量值存在一个基本单元,即一个电子或一个质子电量的绝对值 e,称 e 为基本电荷,它的大小为 $1.60217733(49)\times10^{-19}$C。如果实验验证了夸克的存在,基本电荷的电量将是 $e/3$。

电子 electron 20 世纪发现的第一个稳定的基本粒子。电子带负电,电量的绝对值 $e=1.60217733(49)\times10^{-19}$C,即基本电荷。电子的静止质量 $m_e=9.10953\times10^{-31}$kg。如果将电子看做一个电荷均匀分布的带电小球,可求得电子的经典半径为 $R_e\approx2.8\times10^{-15}$m。

电荷密度 charge density 从宏观效果来看,带电体上的电荷可以认为是连续分布的。电荷分布的疏密程度可用电荷密度来量度。体分布的电荷用电荷体密度来量度,面分布和线分布的电荷分别用电荷面密度和电荷线密度来量度。

电荷体密度 volume density of charge 当带电体上的电荷体分布时,定义电荷体密度

$$\rho=\lim_{\Delta v\to0}\frac{\Delta q}{\Delta v}=\frac{dq}{dv}$$

式中的 Δv 是带电体内的小体积元，Δq 是 Δv 中的电量。显然，ρ 在数值上等于带电体中单位体积内的电荷量。ρ 的单位是 C/m^3。

电荷面密度 surface density of charge 当电荷分布在曲面上时，定义电荷面密度

$$\sigma = \lim_{\Delta S \to 0} \frac{\Delta q}{\Delta s} = \frac{dq}{ds}$$

式中的 ΔS 是曲面上的面积元，Δq 是 Δs 上的电量。显然，σ 在数值上等于带电体内单位面积上的电荷量。σ 的单位是 C/m^2。

电荷线密度 linear density of charge 当电荷分布在曲线上时，定义电荷线密度

$$\lambda = \lim_{\Delta l \to 0} \frac{\Delta q}{\Delta l} = \frac{dq}{dl}$$

式中的 Δl 是曲线上的线元，Δq 是 Δl 上的电量。显然，λ 在数值上等于带电体内单位长度上的电荷量。λ 的单位是 C/m。

摩擦起电 triboelectrification 不同材料制成的原来不带净电荷的两个物体，经过相互摩擦后，在一个物体上带净的正电荷，另一个物体上带净的负电荷的现象叫摩擦起电现象。摩擦起电的过程是一个物体失去一些电子，而另一个物体获得这些电子的过程。因此，摩擦起电的过程符合电荷守恒定律，在相互摩擦的两个物体上带等量异号的净电荷。一般情况下，相互摩擦的两个物体中，容易失去电子的物体带正的净电荷。

静电感应 electrostatic induction 将导体放入电场中，导体内的自由电荷在电场力的作用下重新分布的现象叫做静电感应。静电感应过程中，重新分布的自由电荷将在导体内产生附加电场，其场强方向与外加电场的场强方向相反，阻止自由电荷重新分布。当附加电场场强与外加电场场强大小相等时，导体内的合场强为零，导体上自由电荷的分布状态不再改变，导体处于静电平衡状态。由此可知，导体的静电平衡条件是：导体内部的场强等于零。达到静电平衡的导体是一个等势体，其表面是一等势面。导体表面附近的场强与导体表面垂直，净电荷分布在导体的表面上，曲率大处电荷密集，曲率小处电荷稀疏。

电荷守恒定律 conservation law of charge 在一个孤立系统内，不论发生什么过程（机械的、电的、化学的或核的），系统内正负电荷的代数和保持不变。这就是电荷守恒定律。电荷守恒定律是自然界的基本定律之一。

导体 conductor 具有良好的导电性能的物体叫导体。导体的特点是其内部有大量的自由电荷，这些电荷在电场的作用下能自由移动。导体导电性能的优劣用电导率 σ 来描述，σ 越大，导电性能越好。银、铜、铝等金属导体的电导率都在 10^8S/m 量级。常常把金属等以自由电子导电的物体叫第一类导体，把酸、碱、盐等电解液叫第二类导体，把电离气体叫第三类导体。

电介质 dielectric 电介质即绝缘介质（绝缘体）。电介质内部只有极少数的自由电子，因此不能传导电流，具有良好的电绝缘性能。将电介质放入电场中会发生极化现象，产生极化电荷（束缚电荷）。当电场强度很强且超过某一极限值（介电强度）时，电介质的电绝缘性能会遭到破坏（介质击穿）而转变成导体。良好电介质的电导率小于 10^{-15}S/m。

半导体 semiconductor 半导体是导电能力介于导体和绝缘体之间的物体，其电导率在 10^{-10}～10^5S/m 之间。半导体和导体、电介质之间本质上的区别要用固体能带理论才能确切说明。硅、锗、砷化镓等都是半导体。半导体中的导电粒子（载流子），有带负电的电子和带正电的空穴两种。主要靠电子导电的半导体叫 n 型半导体，主要靠空穴导电的半导体叫 p 型半导体。将 p 型半导体和 n 型半导体结合起来，在它们的交界处会形成一个特殊的区域，叫 pn 结。用 pn 结可以制成各种半导体器件。

超导体 superconductor 超导体是具有完全导电性和完全抗磁性的导体。许多金属、合金和氧化物，在温度低于某个温度值 T_c 时都有超导电性。T_c 叫临界温度或转变温度。例如汞的 T_c 为 4.2K。金属材料的转变温度都比较低，因此，研制高 T_c 的超导材料是当今超导研究领域的重要课题。

迄今为止，高温超导材料的转变温度已高达 135K。

库仑定律 Coulomb law 库仑定律是1785年法国科学家库仑(Charles Augustin de Coulomb)通过“扭秤实验”总结出来的一条实验定律。定律表述如下:在真空中两个静止的点电荷 q_1 和 q_2 之间相互作用力的大小与两个点电荷的电量的乘积成正比,与两个点电荷间距离 r 的平方成反比。作用力的方向沿着它们的连线。同种电荷互相排斥,异种电荷互相吸引。库仑定律的数学表达式为

$$\boldsymbol{F}_{12} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\hat{\boldsymbol{r}}_{12}$$

式中 $\boldsymbol{F}_{12}$是 q_2 对 q_1 的作用力,$\hat{\boldsymbol{r}}_{12}$是由 q_2 指向 q_1 的单位矢量,ε_0 是真空介电常数,它的值近似等于 8.85×10^{-12}F/m。

真空电容率 permittivity of free space 真空电容率又叫真空介电常数,是一个通过实验测定的物理常量,用 ε_0 表示,在国际单位制中,它的值等于 $8.854187818\times10^{-12}\mathrm{C^2/N\cdot m^2}$(或 F/m)。真空电容率 ε_0 和真空磁导率 μ_0 的乘积的开方的倒数等于真空光速。

电场 electric field 电场是一种客观存在的特殊物质,是电荷间相互作用力的传递者。电荷能激发电场,随时间变化的磁场也能激发电场。相对于观察者静止的电荷激发的电场叫静电场,它是一种保守场;随时间变化的磁场激发的电场叫涡旋电场,它是非保守场。电场是统一电磁场的一个方面。

试探电荷 test charge 试探电荷是为了定量研究电场的分布情况而建立的一个电荷模型,它必须满足下列条件:(1)试探电荷带正电,它的电量必须足够的小,当把它引入电场时,几乎不改变原来电场的分布;(2)它的线度必须足够的小,可以把它看做点电荷。

电场强度 electric field intensity 描述电场大小和方向的物理量,用字母 $\boldsymbol{E}$ 表示。电场中某点 $\boldsymbol{E}$ 的定义式为

$$\boldsymbol{E} = \frac{\boldsymbol{F}}{q_0}$$

式中的 q_0 是置于场中该点处的试探电荷的电量,$\boldsymbol{F}$ 是 q_0 所受的电场力。由上式可知,电场中某点电场强度的大小等于单位正电荷在该点所受电场力的大小,其方向与正电荷在该处所受电场力的方向一致。电场强度的单位是N/C(或 V/m)。

电场强度叠加原理 superposition principle of electric field intensity 在 N 个点电荷(q_1、q_2、…… q_n)组成的电荷系统的电场中,任意一点的电场强度 E 等于每个点电荷单独存在时在该点产生的电场强度($\boldsymbol{E}_1$、$\boldsymbol{E}_2$、…… $\boldsymbol{E}_n$)的矢量和,即

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_1 + \boldsymbol{E}_2 + \cdots + \boldsymbol{E}_n$$

这就是电场强度叠加原理,简称场强叠加原理。电荷连续分布的带电体激发的场强可由如下积分公式计算

$$\boldsymbol{E} = \int \frac{\mathrm{d}q}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\hat{\boldsymbol{r}}$$

式中的 $\mathrm{d}q$ 是在带电体上选取的电荷元,r 是 $\mathrm{d}q$ 至场点的距离,$\hat{\boldsymbol{r}}$ 是单位矢量。

电偶极子 electric dipole 一对等量、异号的点电荷,当它们之间的距离远小于场点到它们的距离时,这两个点电荷构成的电荷系统叫做电偶极子。

电偶极矩 electric dipole moment 设构成电偶极子的点电荷对的电量为 $\pm q$,它们之间的距离为 l,规定矢量 $\boldsymbol{l}$ 的方向沿着 l 由负电荷指向正电荷,把 q 与 $\boldsymbol{l}$ 的乘积叫做电偶极子的电偶极矩 $\boldsymbol{p}_e$,即

$$\boldsymbol{p}_e = q\boldsymbol{l}$$

对一个电量为 q 的点电荷,其电偶极矩定义为 $\boldsymbol{p}_e = q\boldsymbol{r}$,$\boldsymbol{r}$ 为 q 的位置矢量;对于分布在一个小范围内的电荷系统,其电偶极矩为

$$\boldsymbol{p}_e = \int_v \rho\boldsymbol{r}\,\mathrm{d}v$$

式中的 $\boldsymbol{r}$ 是电荷元 $\rho\mathrm{d}v$ 的位置矢量。

电场线 electric field line 电场线是为了直观形象地描述电场分布,在电场中引入的一些假想的曲线。曲线上每一点的切线方向和该点电场强度的方向一致;曲线密集的地方场强强,稀疏的地方场强弱。静电场的电场线有如下性质:(1)电场线起始于正电荷(或来自无限远处),终止于负电荷(或伸向无限远处),不会在没有电荷的地方中断(场强为零的点除外);(2)电场线不会形成闭合曲线;(3)任何两条电场线不会相交。

电通量 electric flux 通过电场中某曲面 S 的电通量定义为

$$\Phi_e = \iint_S \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

式中 $\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 是曲面 S 上选取的面积元，$\boldsymbol{E}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 处的电场强度。当曲面 S 闭合时，上式可改写成

$$\Phi_e = \oiint_S \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

规定闭合曲面的外法线方向为面积元法向的正方向。因此，穿出闭合曲面的电通量为正值，穿入闭合曲面的电通量为负值。

均匀电场 uniform electric field 大小处处相等，方向相同的电场叫均匀电场。无限大均匀带电平面产生的电场为均匀电场。在均匀电场中，如果取坐标原点为电势零点，则距坐标原点 r 处的电势 U 与电场强度 E 的关系为：$U = -Er\cos\theta$，这里的 θ 是 $\boldsymbol{r}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 之间的夹角。

电势 electric potential 描述静电场性质的物理量。静电场中某点 p 的电势 U 定义为从该点到零电势点移动单位正电荷时电场力做的功，即

$$U = \frac{W}{q} = \int_p^{\text{零电势点}} \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

式中的 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是电荷 q 移动路径上的线元，$\boldsymbol{E}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 处的电场强度。当电荷分布在有限区域内时，常选无限远点为零电势点，因此上式可写成

$$U = \int_p^{\infty} \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

电势的单位是 V。

电势差 electric potential difference 静电场中任意两点的电势之差，它等于将单位正电荷从电场中一点移到另一点时电场力所做的功。若电场中 p、q 两点的电势分别为 U_p 和 U_q，则两点的电势差 U_{pq} 为

$$U_{pq} = U_p - U_q = \int_p^q \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

等势面 equipotential surface 静电场中电势相等的点构成的曲面叫等势面。等势面有下列性质：(1)等势面与电场线处处正交；(2)等势面密集的地方场强强，稀疏的地方场强弱。

电势能 electric potential energy 静电场中某点的电荷和电场系统间的互作用能叫做电荷在该点处的电势能或静电势能。它是一个相对量，是相对选定的零势能点的势能差。点电荷 q 在静电场中某点 P 的电势能等于把它从该点移至零势能点处电场力所做的功，即

$$W_P = \int_P^{\text{零势能点}} q\boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

电场中某点处点电荷的静电势能也等于点电荷的电量与该点电势 U_P 的乘积，即 $W_P = qU_P$。静电场力作正功时电荷的静电势能减小，作负功时电荷的静电势能增加。

电势梯度 electric potential gradient 电势梯度是一个矢量，场中一点电势梯度的方向沿该点等势面的法线指向电势增加的方向，它的大小等于该点电势函数 U 空间变化率的最大值，常用 $\mathrm{grad}\,U$ 或 ∇U 表示。算符 ∇ 在不同的坐标系中有不同形式，在直角坐标系、柱坐标系和球坐标系中，算符 ∇ 的表示式分别如下所示：

$$\nabla = \hat{\imath}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\jmath}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}$$

⇔(直角坐标系)

$$\nabla = \hat{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \hat{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

⇔(球坐标系)

$$\nabla = \hat{e}_\rho\frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{e}_\phi\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \phi} + \hat{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

⇔(柱坐标系)

式中 $\hat{\imath}$、$\hat{\jmath}$、$\hat{k}$，$\hat{e}_r$、$\hat{e}_\theta$、$\hat{e}_\phi$ 和 $\hat{e}_r$、$\hat{e}_\theta$、$\hat{e}_z$ 分别是三种坐标系中坐标轴方向的单位矢量。静电场的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和电势梯度的关系为 $\boldsymbol{E} = -\nabla U$。

静电平衡 electrostatic equilibrium 当带电体系中的电荷静止不动，致使电场分布不随时间变化时，该带电体系就达到了静电平衡。均匀导体达到静电平衡的条件是导体内部的场强处处为零。处于静电平衡状态的导体是一个等势体，其表面是一个等势面；电荷分布在导体表面上，表面曲率大处电荷密集，表面曲率小处电荷稀疏；导体外紧靠导体表面处的场强与导体表面垂直，场强的大小为 σ/ε_0，σ 是导体表面的电荷面密度，ε_0 是真空介电常数。

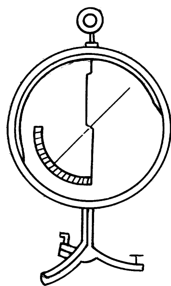
静电屏蔽 electrostatic shielding 在静电平衡状态下，不接地导体空腔内的电场分布不受腔外电场分布的影响，接地导体空腔内、外的

电场分布不会互相影响，这就是静电屏蔽现象。金属导体空腔叫静电屏。

静电透镜 electrostatic lens 静电透镜是一种静电装置，它能产生特殊分布的静电场，并使通过其间的电子束聚焦或成像。例如带圆孔的金属板、示波管中的控制电极和阳极等都可构成静电透镜。因为它们的作用类似使光线聚焦或成像的光学透镜，所以称之为静电透镜。

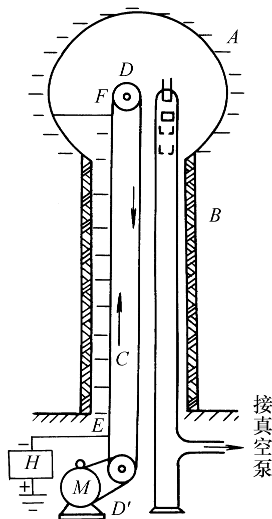
静电聚焦 electrostatic focusing 利用特殊分布的静电场使带电粒子束聚焦的方法。

静电计 electrometer 静电计是测量带电物体的电量和电势的仪器，其结构如下图所示。装有玻璃窗的接地金属圆筒内绝缘地安装一根金属杆，在金属杆上安装一根可以自由偏转的金属指针，杆的下端装一弧形标尺。带电体与金属杆上端的金属球接触时，指针发生偏转，带电体的电势越高，指针偏转的角度就越大。经过校正，可根据指针偏转的角度来测量带电体的电势。



静电起电机 electrostatic machine 利用导体的静电性质，通过摩擦起电、尖端现象、静电感应等方法，使导体连续不断地带上大量的电荷，从而产生高电压的装置叫静电起电机。典型的静电起电机有静电感应起电机、范德格拉夫起电机等。

范德格拉夫起电机 Van de Graaff generator 范德格拉夫起电机是由美国科学家范德格拉夫(Robert Jemison Van de Graaff)于1929年发明的一种静电起电机，它的原理性结构如下图所示。金属球壳 A 由绝缘支柱 B 支撑，用电动机驱动的滑轮 D 和 D' 上装有由丝织物制成的传送带 C。E、F 是两个金属尖针，E 与高压直流电源相接，F 与 A 球相连。E 因尖端效应不断放电，使传送带 C 带电，传送带上的电荷到达 F 附近时，又因 F 的尖端作用使电荷传递到 A 球的外表面。传送带不停地给 A 球输送电荷，可使 A 球的电势高达几兆伏特。



电容器 capacitor 电容器是一种储电器件，通常是由靠得很近而又互相绝缘的两个导体构成，这两个导体叫电容器的电极。实际使用时，电容器两个电极上带等量异号电荷，带正电荷的电极叫正极，带负电荷的电极叫负极。电容器的种类很多，按电极的形状分类有平行板电容器、球形电容器、柱形电容器等；按电极间的电介质分类有空气电容器、纸介电容器、云母电容器、瓷介电容器、有机薄膜电容器、电解电容器等；还有可变电容器、微调电容器、线性电容器、时变电容器等等。

电容器的电容 capacitance of capacitor 电容器一个电极上的电量的绝对值 q 与电容器两电极间电势差 ΔU 的比值叫电容器的电容，常用字母 C 表示，即

$$C=\frac{q}{\Delta U}$$

电容器的电容量取决于电容器的形状、尺寸和极板间电介质的性质。在国际单位制中，电容

的单位为法拉，简称法，符号是 F。

电容器的串联 series connection of capacitors 将若干个电容器首尾相接连成一串叫电容器的串联。串联电容器两端的总电压等于各个电容器两电极间电压的和；串联电容器的总电容的倒数等于各个电容器电容量倒数的和。

电容器的并联 parallel connection of capacitors 将若干个电容器的正极与正极连在一起，负极与负极连在一起，叫电容器的并联。并联电容器两端的总电压等于各个电容器两电极间的电压，并联电容器的总电容等于各个电容器电容量的和。

电介质的极化 dielectric polarization 将电介质放入外电场 E_0 中，在电场的作用下，电介质内部或界面上出现净的束缚电荷的现象叫电介质的极化。这种束缚电荷又叫极化电荷，它会在周围空间产生附加电场 E'，从而改变了原来的电场分布。不同种类电介质的极化机制不同，无极分子电介质的极化机制是：在电场力的作用下正、负电荷中心被拉开而极化，常称之为电子位移极化；有极分子电介质的极化机制是：在电场力的作用下分子偶极矩沿外电场方向整齐排列而极化，常称之为分子取向极化。有极分子也有电子位移极化，但比分子取向极化弱得多。

有极分子 polar molecule 电介质分子中的正、负电荷虽然等量，但正、负电荷并非集中分布在分子中的一点上，而是分布在一定的区域内。分子中所有正（负）电荷对远离分子的某点的影响可以等效为单个正（负）点电荷的影响，这个等效正（负）点电荷所在的位置叫做分子的正（负）电“中心”或“重心”。正、负电荷的中心不重合的分子叫有极分子。有极分子的等效点电荷的电量与正、负电荷中心间距的乘积叫做有极分子电偶极矩，简称分子偶极矩。

无极分子 non-polar molecule 如果电介质分子的正、负电荷中心重合，这种分子就叫无极分子。无极分子电介质的分子偶极矩为零。

极化强度 polarization 极化强度是描述电介质极化程度的物理量，常用字母 $\boldsymbol{P}$ 表示。它等于极化介质中单位体积内分子电偶极矩的矢量和。如果以 $\boldsymbol{P}_{分子}$ 表示极化介质分子的分子偶极矩，ΔV 表示介质中的小体积元，那么

$$\boldsymbol{P}=\lim_{\Delta V\to 0}\frac{\sum \boldsymbol{P}_{分子}}{\Delta V}$$

若电介质中各点 P 的大小相等，方向相同，则电介质被均匀极化。否则为非均匀极化。极化强度矢量的单位是 $\mathrm{C/m^2}$。

极化电荷 polarization charge 将电介质放入电场中，在电场的作用下电介质被极化，介质内部或表面上出现净的束缚电荷，这种束缚电荷就是极化电荷。极化电荷 Q' 与极化强度矢量 $\boldsymbol{P}$ 的关系为：极化强度矢量对闭合曲面的通量等于闭合曲面包围的极化电荷电量的负值，即

$$Q'=-\oint_S \boldsymbol{P}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

极化电荷的面密度 σ' 和极化电荷体密度 ρ' 与极化强度矢量 $\boldsymbol{P}$ 的关系为

$$\sigma'=(\boldsymbol{P}_1-\boldsymbol{P}_2)\cdot\hat{n}\qquad \rho'=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}$$

式中的 $\boldsymbol{P}_1$、$\boldsymbol{P}_2$ 是两种电介质中交界面处的极化强度矢量，$\hat{n}$ 是介质交界面法线方向的单位矢量。

极化率 polarizability 电介质中极化强度 $\boldsymbol{P}$ 和电场强度 $\boldsymbol{E}$ 的关系叫电介质的极化规律。实验测得各向同性线性介质的极化规律为

$$\boldsymbol{P}=\chi\varepsilon_0\boldsymbol{E}$$

式中的比例系数 χ 叫做电介质的极化率，它与电介质的性质有关，是一个纯数。χ 处处相等的介质叫均匀介质，否则是非均匀介质。线性各向异性电介质的极化率是一个张量。铁电介质的极化率不是常量，它随外加电场的变化而变化。

介电常数 dielectric constant 介电常数又叫电容率，是描述电介质极化特性的参量。相对介电常数用 ε_r 表示，它是一个纯数，$\varepsilon_r=1+\chi$（极化率）；绝对介电常数用 ε 表示，$\varepsilon=\varepsilon_0\varepsilon_r$。$\varepsilon$ 和 ε_0 有相同的单位。

介电强度 dielectric strength 在通常情况下电介质不导电，但是在很强的电场中，电介质的绝缘性能会受到破坏，由绝缘体变成导体，这叫做电介质的击穿。电介质材料能够承受的最大电场强度叫这种电介质的介电强度，也叫击穿电场强度。

退极化场 depolarization field 当电场中存在电介质时,空间任意一点的电场强度 E 等于外加电场强度 E_0 和极化电荷产生的附加电场强度 E'的矢量和。在电介质内部,E'和 E_0 的方向相反,因此,E'起着削弱电介质极化的作用,故称 E'为退极化场。

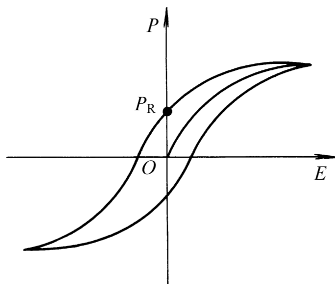
铁电体 ferroelectrics 铁电体是一类特殊的电介质,它有下列特性:(1)极化强度 P 和电场强度 E 有复杂的非线性关系,ε_r 不是常量,它随 E 变,最大可达几千;(2)有电滞现象,在周期性变化的电场作用下,出现电滞回线,有剩余极化强度;(3)当温度超过某一温度时,铁电性消失,这一温度叫做居里(Pierre Curie)温度;(4)铁电体内存在自发极化小区,把这种小区叫做电畴。正是因为存在电畴,铁电体才具有以上这些独特的性质。铁电体是一种应用广泛的电介质,利用它的电、力、光、声等效应可制成各种不同功能的器件。如非线性电容、超声换能器、高频振荡器等。典型的铁电体有酒石酸钾钠单晶、钛酸钡陶瓷等。

驻极体 electret 极化后能长久保持极化强度的电介质叫驻极体,又叫永电体。许多有机材料(例如:石蜡、硬质橡胶、碳氢化合物、固体酸等)和无机材料(例如:钛酸钡、钛酸钙等)都可用来制备驻极体。制备驻极体的方法有:热驻极法、电驻极法、光照法和辐射法等。驻极体的用途广泛,可用来制造高压电源、换能器、传声器、静电计等。

压电效应 piezoelectric effect 某些具有特殊结构的电介质材料,如石英、钛酸钡等,在外力作用下发生机械形变时会产生极化,介质的端面上出现符号相反的极化电荷,这种效应叫做压电效应。

电致伸缩 electrostriction 将某些电介质材料置于电场中,介质被极化,产生极化电荷,同时介质会发生机械形变,这就是电致伸缩现象。电致伸缩是压电效应的逆效应,所以又叫逆压电效应。压电效应和电致伸缩应用广泛,据此可制成晶体振荡器、超声波发生器、传感器、压电喇叭等。

电滞回线 ferroelectric hysteresis loop 铁电体在电场中极化时,极化强度随电场强度的增加而非线性增加,当电场强度大到一定值时,极化强度保持不变,铁电体处于极化饱和状态。这时,如果减小极化电场的电场强度,并使电场周期性地变化,极化强度随电场强度的变化过程如图中回线所示。这就是电滞回线。P_R 叫剩余极化强度。



电位移矢量 electric displacement vector 电位移矢量是一个用以描述电场的辅助物理量,用符号 $\boldsymbol{D}$ 表示。它的定义式为

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P}$$

式中 $\boldsymbol{E}$ 是电场强度,$\boldsymbol{P}$ 是极化强度,ε_0 是真空介电常数。$\boldsymbol{D}$ 的单位是 C/m^2。对线性各向同性的电介质有 $\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$,$\varepsilon$ 是电介质的绝对介电常数。电位移矢量又叫电感应强度矢量。

电位移线 lines of electric displacement 电位移线是在电场中引进的一些假想的曲线,曲线上每一点切线的方向和该点电位移矢量 $\boldsymbol{D}$ 的方向一致,曲线密集的地方 $\boldsymbol{D}$ 大,稀疏的地方 $\boldsymbol{D}$ 小。电位移线起始于正的自由电荷,终止于负的自由电荷。

电位移通量 electric displacement flux 通过电场中某曲面 S 的电位移通量定义为

$$\Phi_d = \iint_S \boldsymbol{D} \cdot d\boldsymbol{S}$$

式中 d$\boldsymbol{s}$ 是电场中任意曲面 S 上选取的面积元,$\boldsymbol{D}$ 是 d$\boldsymbol{s}$ 处的电位移矢量。对于闭合曲面,上式可改写成

$$\Phi_d = \oint\!\!\!\oint_S \boldsymbol{D} \cdot d\boldsymbol{S}$$

规定闭合曲面的外法线方向为正方向,穿出闭合曲面的电位移通量为正值,穿入闭合曲面的电位移通量为负值。

高斯定理 Gauss theorem 通过一个任意闭合曲面 S 的电通量 Φ_e 等于该曲面包围的所有电荷电量的代数和 $\sum q$ 除以 ε_0，与闭合曲面外的电荷无关。这就是高斯(Karl Friedrich Gauss)定理。定理的积分表达式为

$$\oiint_S \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \frac{1}{\varepsilon_0} \sum_{(S内)} q$$

引入电位移矢量后，高斯定理可表述为：通过一个任意闭合曲面的电位移通量等于该曲面包围的所有自由电荷 q_0 的代数和。其积分表示式为

$$\oiint_S \boldsymbol{D} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{S} = \sum_{(S内)} q_0$$

高斯定理的微分形式为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho$$

或

$$\nabla \cdot \boldsymbol{D} = \rho_0$$

式中的 ρ 是电荷体密度，ρ_0 是自由电荷体密度。高斯定理是麦克斯韦方程组的一个方程。

静电场环路定理 circulation theorem of electrostatic field 在静电场中，电场强度 E 沿任何闭合路径的线积分恒等于零，即

$$\oint_l \boldsymbol{E} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = 0$$

静电场环路定理表明静电场是保守场，可以引入标量势函数来描述静电场。静电场环路定理的微分形式为

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = 0$$

相互作用能 interaction energy 一个电荷系统的相互作用能，等于从零势能点搬运各个电荷过程中外力克服电场力所作功的代数和。对 N 个点电荷的情况，相互作用能的计算公式为

$$W = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{i-1} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

或

$$W = \frac{1}{8\pi\varepsilon_0} \sum_{i=1}^{N} \sum_{\substack{j=1 \\ (j\neq i)}}^{N} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

或

$$W = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} q_i U_i$$

第三式中的 U_i 是除 q_i 以外所有其他电荷在 q_i 处产生的总电势。对电荷连续分布的单个带电体，其各部分电荷间的相互作用能叫带电体的自能。

静电能 electrostatic energy 带电体系的相互作用能和各个带电体的自能之和叫带电体系的静电能。静电能的计算公式为

$$W = \int \frac{1}{2} U \mathrm{d}q$$

式中的 $\mathrm{d}q$ 是在带电体上选取的电荷元，U 是 $\mathrm{d}q$ 处的电势。对体分布、面分布和线分布的带电体，$\mathrm{d}q$ 分别等于 $\rho \mathrm{d}v$、$\sigma \mathrm{d}s$、$\lambda \mathrm{d}l$，这里的 ρ、σ、λ 分别为带电体的电荷体密度、电荷面密度和电荷线密度。带电体系的静电能就是它的电场能量。

电场能量密度 energy density of electric field 单位体积内的电场能量叫电场能量密度，用 w_e 表示。它的计算公式为

$$w_e = \frac{1}{2} \boldsymbol{D} \cdot \boldsymbol{E} = \frac{1}{2} \varepsilon E^2 = \frac{D^2}{2\varepsilon}$$

带电系统的电场的总能量 W 等于电场区域中各体积元 $\mathrm{d}V$ 中电场能量之和，即

$$W = \iiint_V w_e \mathrm{d}V$$

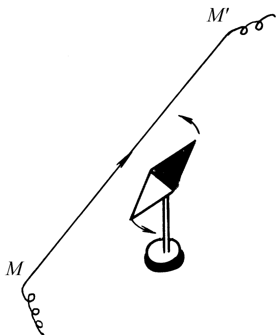
磁极 magnetic pole 具有吸铁特性的物体叫磁体，这种性质叫磁性。磁体上磁性特别强的两端叫磁体的磁极。让一小磁针在水平面内自由转动，静止时它的磁极总是指向南北方向，指向北方的磁极叫北极或 N 极，指向南方的磁极叫南极或 S 极。实验证明，同种磁极互相排斥，异种磁极互相吸引。

二、稳恒磁场

Steady Magnetic Field

奥斯特实验 Oersted experiment 奥斯特实验是 1820 年丹麦科学家奥斯特(Hans Christian Oersted)发表的研究成果。实验装置的原理图如下图所示：导线 MM' 南北放置，导线下方有一可以在水平面内自由转动的小磁针。MM' 中无电流时，小磁针南北指向，MM' 中通上电流时小磁针发生偏转。俯视小磁针，当电流从

M 向 M' 流动时，小磁针逆时针方向转动，电流流向改变，小磁针的转动方向也改变。奥斯特实验验证了电流的磁效应。



磁场 magnetic field 磁场是一种客观存在的特殊物质，它对引入其中的磁极、载流导体和运动电荷有磁力作用，它是磁相互作用的传递者。运动电荷、电流和磁极能激发磁场，随时间变化的电场也能激发磁场。不随时间变化的磁场叫稳恒磁场或静磁场，否则是非稳恒磁场。磁场是统一电磁场的一个方面。

安培定律 Ampere law 安培定律是由法国科学家安培(Ander Marie Ampere)通过一系列的实验研究总结出来的一条定律，它给出了相距 r_{21} 的两个电流元 $I_1\mathrm{d}\boldsymbol{l}_1$ 和 $I_2\mathrm{d}\boldsymbol{l}_2$ 之间相互作用力的大小和方向。定律的数学表达式为

$$\boldsymbol{F}_{21}=\frac{\mu_0 I_1 I_2 \mathrm{d}\boldsymbol{l}_2\times(\mathrm{d}\boldsymbol{l}_1\times\hat{\boldsymbol{r}}_{21})}{4\pi r_{21}^2}$$

式中 $\boldsymbol{F}_{21}$ 是电流元 $I_1\mathrm{d}\boldsymbol{l}_1$ 给 $I_2\mathrm{d}\boldsymbol{l}_2$ 的作用力，r_{21} 是两电流元之间的距离，$\hat{\boldsymbol{r}}_{21}$ 是单位矢量，μ_0 是真空磁导率。

真空磁导率 permeability of free space 真空磁导率是一个物理常量，用 μ_0 表示，在国际单位制中，它的值为 $4\pi\times10^{-7}$ 亨利/米(H/m)。它与真空介电常数 ε_0 乘积的开方的倒数等于真空光速。

磁感应强度 magnetic induction 描述磁场大小和方向的物理量，用字母 $\boldsymbol{B}$ 表示。磁场中某点磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的大小等于单位正电荷以单位速度通过该点时受到的最大作用力，即

$$B=\frac{F_{\max}}{qv}$$

式中 q 是点电荷的电量，v 是 q 的速度，$F_{\max}$ 是 q 受到的磁场力的最大值。$\boldsymbol{B}$ 的方向即该处小磁针 N 极的指向。$\boldsymbol{B}$ 的单位是 T。

磁感应线 line of magnetic induction 为了直观形象地描述磁场的分布而在磁场中引进的一系列假想的曲线，这些曲线上每一点切线的方向和该点 $\boldsymbol{B}$ 的方向一致，曲线密集的地方 $\boldsymbol{B}$ 大，曲线稀疏的地方 $\boldsymbol{B}$ 小。磁感应线简称 $\boldsymbol{B}$ 线，它是一系列的闭合曲线。

磁通量 magnetic flux 通过磁场中某曲面 S 的磁通量定义为

$$\Phi_B=\int_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

式中的 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 是在曲面 S 上选取的面积元，$\boldsymbol{B}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}$ 处的磁感应强度。在国际单位制中，磁通量的单位是 Wb。

毕奥-萨伐尔定律 Biot-Savart law 毕奥-萨伐尔定律是由法国科学家毕奥(Jean Baptiste Biot)和萨伐尔(Felix Savate)通过实验研究、并由拉普拉斯(Pierre Simon Laplace)从数学上予以证明后总结出来的一条定律，它给出了电流元 $I\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 在空间某点 P 处激发的磁感应强度 $\mathrm{d}\boldsymbol{B}$ 的大小和方向。定律的数学表达式为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0 I\mathrm{d}\boldsymbol{l}\times\hat{\boldsymbol{r}}}{4\pi r^2}$$

式中 r 是 $I\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 到 P 点的距离，$\hat{\boldsymbol{r}}$ 是单位矢量，μ_0 是真空磁导率。对上式积分可求得任意形状线电流产生的磁感应强度。

亥姆霍兹线圈 Helmholtz coil 亥姆霍兹(Hermann von Helmholtz)线圈是间距等于半径的一对共轴圆线圈。在线圈中通以同向稳恒电流 I 时，在线圈间轴线的中点附近能产生一小范围的均匀磁场区。

磁场的高斯定理 "Gauss theorem" of magnetic field 通过磁场中任一闭合曲面的磁感应通量恒等于零。定理的积分表示式为

$$\oint_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}=0$$

定理的微分表示式为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$$

磁场的高斯定理是麦克斯韦方程组的一个方程。

安培力 Ampere force 载流导线在磁场中受的磁场力叫安培力。求算安培力的数学公式为

$$\mathrm{d}\boldsymbol{F} = I\mathrm{d}\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{B}$$

式中的 $I\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是载流导线上的电流元，$\boldsymbol{B}$ 是磁场中 $I\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 处的磁感应强度，$\mathrm{d}\boldsymbol{F}$ 是 $I\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 受到的安培力。对上式积分可求得整个载流导线或载流线圈在磁场中受到的安培力。

磁矩 magnetic moment 载流平面线圈的电流强度 I 和线圈面积 S 的乘积叫载流线圈的磁矩。磁矩是一个矢量，它的方向和线圈平面的法线方向一致。用 $\boldsymbol{m}$ 表示线圈的磁矩，$\hat{\boldsymbol{n}}$ 表示线圈平面法线方向的单位矢量，则

$$\boldsymbol{m} = IS\hat{\boldsymbol{n}}$$

载流线圈的磁矩的一般计算公式为

$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{2}\oint I\boldsymbol{r} \times \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

对于体分布的电流，磁矩的计算公式为

$$\boldsymbol{m} = \frac{1}{2}\int \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{j}\mathrm{d}v$$

式中的 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是在电流线圈上选取的线元，$\mathrm{d}v$ 是在体电流中选取的体积元，$\boldsymbol{j}$ 是电流密度，$\boldsymbol{r}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$（或 $\mathrm{d}v$）的位置矢量。

磁偶极子 magnetic dipole 当场点到载流小线圈的距离远大于它的尺寸时，这个载流小线圈就是一个磁偶极子。磁荷观点认为，磁场是由磁荷产生的，磁针的 N 极带正磁荷，S 极带负磁荷，磁荷的多少用磁极强度 q_m 来表示。相距 l、磁极强度为 $\pm q_m$ 的一对点磁荷，当 l 远小于场点到它们的距离时，$\pm q_m$ 构成的系统叫磁偶极子。

洛伦兹力 Lorentz force 洛伦兹（Hendrik Antoon Lorentz）力是磁场对运动电荷的作用力。电量为 q、速度为 v 的带电粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中运动时，受到的洛伦兹力 $\boldsymbol{F}$ 为

$$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})$$

洛伦兹力的方向与运动电荷的速度方向垂直，故它不对运动电荷作功。

拉莫尔半径 Larmor radius 在洛伦兹力的作用下，带电粒子在磁场中作圆周运动的轨道半径叫拉莫尔半径，也叫回旋半径。若磁场的磁感应强度为 $\boldsymbol{B}$，带电粒子的电量为 q，速度为 v，v 与 $\boldsymbol{B}$ 的夹角为 θ，则拉莫尔半径为：

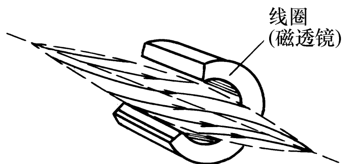
$$R = \frac{mv\sin\theta}{qB}$$

回旋共振频率 cyclotron resonance frequency 带电粒子在磁场中作回旋运动时每秒钟旋转的圈数叫回旋共振频率。若用 f 表示回旋共振频率，那么质量为 m、电量为 q 的带电粒子在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的回旋共振频率为

$$f = \frac{qB}{2\pi m}$$

低速时 f 与带电粒子的速度和回旋半径无关。

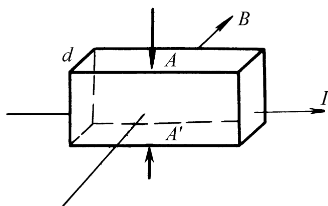
磁透镜 magnetic lens 能产生特殊的磁场分布、并使通过其中的带电粒子聚焦的装置叫磁透镜。常用专门设计的能产生非均匀磁场的短线圈作磁透镜（见图）。



磁聚焦 magnetic focusing 利用磁透镜或磁场使带电粒子聚焦的方法叫做磁聚焦。

荷质比 specific charge 带电粒子的电荷量与质量之比叫荷质比。在低速（$v \ll C$）情况下，带电粒子的荷质比几乎不变，高速运动时，速度越大，荷质比越小。

霍尔效应 Hall effect 1879 年美国科学家霍尔（Edwin Herbert Hall）首先发现，将通有电流的导体薄板放入与板面垂直的磁场中时（见图），板的两侧会出现电势差，这就是霍尔效



应。图中导体薄板两侧 AA' 两点之间电势差的大小为

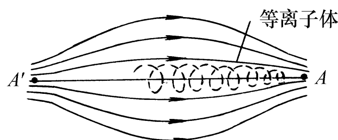
$$U=\frac{1}{nq}\frac{IB}{d}$$

式中的 I 是导体薄板内的电流强度，B 是外加磁场的磁感应强度，d 是导体薄板的厚度，n 是导体中载流子的浓度，q 是载流子的电量。把上式中的 U 叫做霍尔电压，$1/nq$ 叫做霍尔系数。对单价金属，实验测得的霍尔电压 U 与利用上式计算的结果符合得很好，对非单价金属、铁磁材料和半导体则相差很大。霍尔效应在电子技术、测量技术、自动控制技术等领域中有着广泛的应用。

霍尔系数 Hall coefficient 见“霍尔效应”。

高斯计 Gauss meter 高斯计(现称毫特斯拉计)是根据霍尔效应制成的测量磁感应强度的仪器，它由霍尔探头和测量仪表构成。霍尔探头在磁场中因霍尔效应而产生霍尔电压，测出霍尔电压后根据霍尔电压公式和已知的霍尔系数可确定磁感应强度的大小。高斯计的读数以高斯或千高斯为单位。

磁镜 magnetic mirror 带电粒子在如图所示的缓变非均匀磁场 B 中运动，从弱场区进入强场区过程中，粒子的横向速度会增大，纵向速度将减小。到达磁感应强度足够强的 A 点(或 A' 点)时，带电粒子的纵向速度变为零，然后向相反方向运动。带电粒子的这种运动方式类似光线在反射镜间的反射。因此，把如图所示形式的磁场叫做磁镜。利用磁镜可以约束等离子体。



范·艾伦辐射带 Van Allen radiation belts 地球是个大磁体，两极处磁场强，赤道处磁场弱，构成一个天然的磁镜。它约束着宇宙线中的大量带电粒子，使之沿着地磁场的磁力线方向作螺旋运动，形成几个环绕地球的辐射带。这种辐射带叫做范·艾伦(James Alfred Van Allen)辐射带。

磁介质 magnetic medium 磁介质是指放入磁场中能显示磁性，产生附加磁场，从而改变原来磁场分布的物质。自然界中的所有实体物质(气体、液体、固体)都是磁介质。磁介质可分为三大类：顺磁质(如铝、铂、氧等)、抗磁质(如金、铜、氢等)、铁磁质(如铁、钴、镍等)。

分子电流 molecular current 任何物质都是由分子(原子)构成的。在经典原子模型中，分子中的电子绕原子核作轨道运动，形成轨道电流，构成轨道磁矩 μ_L。电子还有自旋磁矩 μ_S。因此，电子的总磁矩 $\mu=\mu_L+\mu_S$。把整个分子(原子)中所有电子对外界产生的磁效应等效为一个圆电流 $I_{分子}$ 的磁效应，称圆电流 $I_{分子}$ 为分子电流。分子电流的磁矩叫分子磁矩，用 $\boldsymbol{m}_{分子}$ 表示，$\boldsymbol{m}_{分子}=I_{分子}S\hat{\boldsymbol{n}}$，$S$ 是分子电流围的面积，$\hat{\boldsymbol{n}}$ 是 S 法线方向的单位矢量。

分子磁矩 molecular magnetic moment 见“分子电流”。

磁介质的磁化 magnetization of magnetic medium 原来不显示磁性的磁介质在外磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 的作用下显示磁性，产生附加磁场的现象叫磁介质的磁化。磁化后，在介质表面或内部有等效的磁化电流，若磁化电流产生的附加磁场为 $\boldsymbol{B}'$，则磁介质内的总磁场为 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}'$。介质磁化的程度取决于 $\boldsymbol{B}$ 的大小。

磁化强度 magnetization 描述磁介质磁化状态(磁化方向和磁化程度)的物理量，用 $\boldsymbol{M}$ 表示，它是一个矢量，它等于磁介质中单位体积内分子磁矩的矢量和，即

$$\boldsymbol{M}=\frac{\sum \boldsymbol{m}_{分子}}{\Delta V}$$

式中的 $\boldsymbol{m}_{分子}$ 是磁介质中的分子磁矩，ΔV 是磁介质内的体积元。若磁介质中 $\boldsymbol{M}$ 的大小处处相等，方向相同，称介质被均匀磁化，否则为非均匀磁化。$\boldsymbol{M}$ 的单位是 A/m。

磁化电流 magnetization current 磁介质磁化后，其分子磁矩沿外磁场方向整齐排列，介质显示磁性，产生附加磁场。产生附加磁场的分子电流用一个宏观电流 I' 来等效，则 I' 叫做磁化电流。I' 与磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 有如下关系：

$$I' = \oint_L \boldsymbol{M} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

均匀磁介质磁化后,磁化电流一般分布在介质的界面上,叫做面磁化电流。将上式用到两种介质的界面上可求得面磁化电流密度 $\boldsymbol{i}'$(介质表面单位宽度上的电流强度)与两种介质中的磁化强度 $\boldsymbol{M}_1$、$\boldsymbol{M}_2$ 的关系:$\boldsymbol{i}' = (\boldsymbol{M}_1 - \boldsymbol{M}_2) \times \hat{\boldsymbol{n}}$。$\hat{\boldsymbol{n}}$ 是介质的界面法线方向的单位矢量。

磁场强度 magnetic field intensity 磁场强度是一个辅助磁矢量,用 $\boldsymbol{H}$ 表示。它的定义式为

$$\boldsymbol{H} = \frac{\boldsymbol{B}}{\mu_0} - \boldsymbol{M}$$

对各向同性线性磁介质,$\boldsymbol{H}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的关系为

$$\boldsymbol{H} = \frac{\boldsymbol{B}}{\mu}$$

式中 μ 是磁介质的绝对磁导率。$\boldsymbol{H}$ 的单位是 A/m。

安培环路定理 Ampere circulation theorem 磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 沿任意闭合回路 L 的环流,等于回路所包围的电流强度代数和的 μ_0 倍。这就是安培环路定理。其数学表示式为

$$\oint_L \boldsymbol{B} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \mu_0 \sum I$$

在有磁介质存在的情况下,把安培环路定理改写成

$$\oint_L \boldsymbol{H} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \sum I_0$$

它表明,磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 沿任意闭合回路 L 的环流等于回路所包围的传导电流 I_0 的代数和。安培环路定理只适用于稳恒磁场的情况。

磁化率 magnetic susceptibility 磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 与磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 的关系叫磁介质的磁化规律。实验证明,各向同性线性介质的 $\boldsymbol{M}$ 与 $\boldsymbol{H}$ 的关系为

$$\boldsymbol{M} = \chi_m \boldsymbol{H}$$

比例系数 χ_m 叫磁介质的磁化率,它是一个仅与磁介质自身性质相关的纯数。各向异性线性磁介质的磁化率是一个张量:

$$\chi_m = \begin{pmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & \chi_{xz} \\ \chi_{yx} & \chi_{yy} & \chi_{yz} \\ \chi_{zx} & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix}$$

铁磁质的磁化率与其磁化状态有关,磁化曲线上不同的点对应的磁化率不相同。

磁导率 magnetic permeability 磁导率是表征磁介质导磁性能的物理量。相对磁导率用 μ_r 表示,在国际单位制中,它是一个纯数,它与磁化率 χ_m 的关系为 $\mu_r = 1 + \chi_m$;绝对磁导率用 μ 表示,它等于真空磁导率 μ_0 和相对磁导率 μ_r 的乘积,即 $\mu = \mu_0 \mu_r$。绝对磁导率的单位是 A/m。

相对磁导率 relative magnetic permeability 见“磁导率”。

绝对磁导率 absolute magnetic permeability 见“磁导率”。

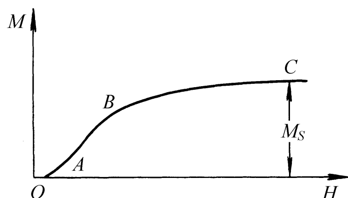
顺磁质 paramagnetic substance 顺磁质是一类磁性较弱的磁介质。它的结构特点是分子的固有磁矩不等于零。通常情况下,由于热运动使分子磁矩排列杂乱无章,介质对外不显示磁性。将顺磁质放入外磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中,在磁场的作用下,原来杂乱无章的分子磁矩转向外磁场方向整齐排列,介质被磁化而显示磁性,产生附加磁场 $\boldsymbol{B}'$,介质内 $\boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{B}' > \boldsymbol{B}_0$。顺磁质的 $\chi_m > 0$,$\mu_r > 1$ 且近似等于1。铝、铂、铬、氧等磁介质属于顺磁质。顺磁质也产生抗磁效应,但比它的顺磁效应弱得多,一般不予考虑。

抗磁质 diamagnetic substance 抗磁质是一类磁性较弱的磁介质。它的结构特点是分子固有磁矩等于零。所以介质对外不显示磁性。将抗磁质放入外磁场 $\boldsymbol{B}_0$ 中,介质被磁化而显示磁性,产生与外磁场方向相反的附加磁场 $\boldsymbol{B}'$,介质内 $\boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{B}' < \boldsymbol{B}_0$。抗磁质的 $\chi_m < 0$,$\mu_r < 1$ 且近似等于1。金、银、铜、氢等磁介质属于抗磁质。

铁磁质 ferromagnetic substance 铁磁质是一类磁性很强($\mu_r \gg 1$)的磁介质。铁磁质内部有许多电子自旋磁矩整齐排列的自发磁化小区,叫磁畴。在未经磁化的铁磁质中,由于热运动,各磁畴的磁化方向杂乱无章,介质在宏观上不显示磁性。将铁磁质放入外磁场中,随着磁场的不断加大,先是那些磁化方向与外磁场方向接近的磁畴扩大自己的范围(叫畴壁外移),继而磁畴的磁化方向逐渐转向外磁场方

向(叫磁畴转向),介质被磁化而显示磁性。铁磁质的磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 和磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 的关系是非线性和非单值的,且有磁滞现象(见“起始磁化曲线”与“磁滞回线”)。当温度高过某一温度时,铁磁质的铁磁性消失。这一临界温度叫居里温度(或居里点)。铁、钴、镍、钆、镝、铁氧体等物质属铁磁质。

起始磁化曲线 initial magnetization curve 将一块没有磁化过(或完全退磁)的铁磁质放入磁场 H 中磁化时,它的磁化强度 M 从零增大到饱和值 M_s 过程中,M 随 H 变化的关系曲线叫起始磁化曲线(如图所示)。它反映了铁磁质磁化过程的共同特点:开始时,M 随 H 缓慢增加(OA 段),接着便急剧增加(AB 段),然后又缓慢增加(BC 段),最后(从 C 点开始)M 达到饱和值 M_s。

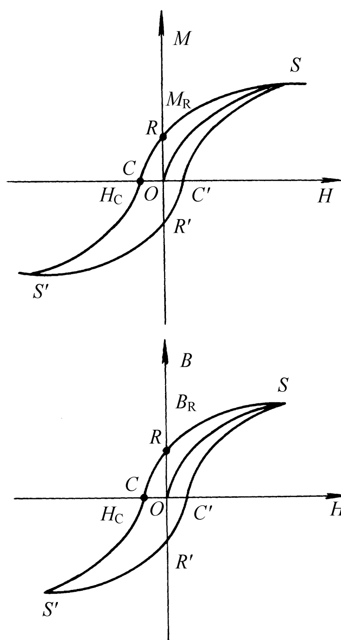


磁滞回线 magnetic hysteresis loop 当铁磁质达到磁饱和状态后,如果减小磁化场 H,介质的磁化强度 M(或磁感应强度 B)并不沿着起始磁化曲线减小,M(或 B)的变化滞后于 H 的变化。这种现象叫磁滞。当磁化场 H 在正负两个方向上往复变化时,M(或 B)随 H 的变化规律如下图所示,图中的闭合曲线即磁滞回线。磁滞回线表明:(1) $H=0$ 时,M(或 B)不为零,M_R叫剩余磁化强度,B_R叫剩余磁感应强度;(2)要使介质完全退磁($M=0$、$B=0$),必须加反方向磁场 H_C,H_C叫矫顽力;(3) M(或 B)与 H 的关系是非线性、非单值关系。

退磁曲线 demagnetization curve 磁滞回线上的 RC 段叫退磁曲线,它表明了铁磁质从剩磁状态(R 点)到完全退磁状态(C 点)的变化过程。

剩余磁感应强度 residual magnetization 见“磁滞回线”。

剩余磁化强度 residual magnetic induction 见“磁滞回线”。



矫顽力 coercive force 见“磁滞回线”。

磁畴 magnetic domain 铁磁质的磁性主要来源于电子自旋磁矩。在无外磁场的情况下,铁磁质内有许多电子自旋磁矩整齐排列的自发磁化小区。这种自发磁化小区就是磁畴。它的体积约为 $10^{-8}\sim10^{-10}\mathrm{m}^3$ 数量级,其中包含 $10^{17}\sim10^{21}$个原子。用实验方法可以观察到铁磁质的磁畴结构。铁磁质的许多特性都起因于磁畴。用量子力学理论能解释磁畴的成因。

饱和磁化强度 saturate magnetization 铁磁质在磁化场中磁化时,一开始,磁化强度矢量的大小随磁化场强的增加而增加。当磁化场强加大到某个值时,如果继续加大磁化场的场强,磁化强度矢量的大小保持不变,介质进入磁化饱和状态。磁化饱和时的磁化强度叫做饱和磁化强度,常用 M_S 表示。

居里点 Curie point 见“铁磁质”。

磁滞损耗 magnetic hysteresis loss 当铁磁质在交变磁场的作用下反复磁化时,介质分子

的状态不断改变,分子振动加剧,温度升高,消耗一定的能量。这种能耗叫磁滞损耗。理论和实践证明,磁滞回线包围的面积越大,磁滞损耗越大。单位体积铁磁材料的磁滞损耗 w 为

$$w = \oint_{\text{磁滞回线}} H\mathrm{d}B$$

式中的 B 是铁磁质中的磁感应强度,H 是铁磁质中的磁场强度。

软磁材料 soft magnetic material 矫顽力很小($H_C < 10^2$A/m)的铁磁材料叫软磁材料。因为矫顽力小,所以软磁材料容易磁化,也容易退磁,磁滞损耗小,适宜用于交变磁场中,用来制造电磁铁、变压器、电机和高频电磁元件的铁心等。纯铁、硅钢、坡莫合金、锰锌铁氧体、镍锌铁氧体等材料都是软磁材料。

硬磁材料 hard magnetic material 矫顽力大($H_C > 10^2$A/m)、剩余磁感应强度也大的铁磁材料叫硬磁材料。各种永磁体都是用硬磁材料制成的。硬磁材料的磁滞回线包围的面积大,因此其磁能积(铁磁质内 B 和 H 乘积的最大值,它是硬磁材料的另一个性能指标)较大,用它来制作电磁器件省材料,有利于器件的小型化。碳钢、钨钢、铝钢、钕铁硼合金等材料都是硬磁材料。

矩磁材料 rectangular magnetic material 磁滞回线近似矩形的铁磁材料叫矩磁材料。它的特点是矫顽力小,剩余磁感应强度 B_R 几乎等于饱和磁感应强度 B_S。若磁化场反向,磁场强度一旦超过矫顽力,矩磁材料的磁化方向立即反转。因此磁化饱和的矩磁材料总是处在 B_S 或 $-B_S$ 状态。所以矩磁材料可用来制作记忆元件。常用的矩磁材料有锰-镁铁氧体、锂-镁铁氧体等。

铁氧体 ferrites 铁氧体是一种非金属磁性材料,又叫铁淦氧。它是由三氧化二铁和一种或几种其他金属氧化物(例如:氧化镍、氧化锌、氧化锰、氧化镁、氧化钡、氧化锶等)配制烧结而成。它的相对磁导率可高达几千,电阻率是金属的 10^{11} 倍,涡流损耗小,适合于制作高频电磁器件。铁氧体有硬磁、软磁、矩磁、旋磁和压磁五类。

永磁体 permanent magnet 外加磁化场去掉后仍能长久保留较强的剩余磁化强度的物体叫永磁体。它通常是由硬磁材料磁化而成。

地磁场 geomagnetic field 地球是一个巨大的磁体,它在空间产生的磁场即地磁场。卫星探测发现,地磁场被局限在地球周围有限的区域内,这个区域叫地磁层。地磁轴和地球自转轴不相重合,地磁南极在地理北极附近,地磁北极在地理南极附近。地磁场的大小和方向随时间、地点而变,且除地磁赤道处以外的地磁场都不是水平的。常用磁倾角、磁偏角、地磁场水平强度(地磁场的水平分量)这三个要素来描述地磁场的大小和方向。地磁两极在地面上的位置也在变化,考古发现,在过去的400万年中,地球磁极已经倒转了九次之多。地球磁极处的磁感应强度约为 0.6×10^{-4} 特斯拉(T),地磁赤道处的磁感应强度约为 0.3×10^{-4}T。

磁倾角 magnetic inclination 地磁场中某处磁感应强度矢量与水平面的夹角叫磁倾角。地磁赤道处的磁倾角为零度,地磁两极处的磁倾角为90度。

磁偏角 magnetic declination 在地磁场中某处,小磁针静止时所在的铅直平面(即地磁场的磁感应强度矢量所在的铅直平面)叫地磁子午面,这个面与地理子午面之间的夹角叫磁偏角。地球上不同地点的磁偏角是不相同的,而且磁偏角是随时间变化的。

磁屏蔽 magnetic shielding 铁磁材料制成的闭合空腔能削弱腔外磁场对空腔内部的影响。例如,用铁制成闭合空腔,并将其放入外磁场中,实验证明,磁感应通量差不多全部集中在腔壁之中,腔内的磁场几乎为零,因此,铁制闭合空腔内的物体不受外界磁场的影响,这就叫磁屏蔽。

磁致伸缩 magnetostriction 铁磁质磁化状态改变时引起其长度和体积微小变化的现象。这种效应在微小机械振动的检测和超声换能器方面有广泛的应用。磁致伸缩的逆效应叫压磁效应,即受机械力拉伸或压缩时,铁磁质被磁化的现象。

磁路 magnetic circuit 磁路通常是指由铁磁材料或铁磁材料和气隙等构成的闭合回路。

磁阻 magnetic resistance 磁路中的一个与电路中的电阻相对应的物理量,用 R_m 表示。一段粗细均匀长为 l_i 的磁路的磁阻 R_{mi}为

$$R_{mi}=\frac{l_i}{\mu S_i}$$

式中的 S_i 是这段磁路的横截面积,μ 是构成这段磁路的磁介质的绝对磁导率。n 个磁阻串联时的总磁阻等于各个磁阻阻值的和;n 个磁阻并联时,总磁阻的倒数等于各磁阻倒数的和。

磁位降落 drop of magnetic potential 一段磁路上的磁感应通量与这段磁路磁阻的乘积叫该段磁路上的磁位降落。它也等于这段磁路上的磁场强度与这段磁路长度的乘积。

磁路定理 magnetic circuit theorem 磁路上的励磁线圈的匝数与励磁电流强度的乘积叫磁动势。一个闭合磁路的磁动势等于其各分段磁路上磁位降落的和,这就是磁路定理,其数学表达式为

$$E_m=\sum_i \Phi_i R_{mi}$$

式中 Φ_i 是第 i 段磁路的磁感应通量,R_{mi}是第 i 段磁路的磁阻,E_m 是闭合磁路的磁动势。

三、电磁感应

Electromagnetic Induction

法拉第电磁感应定律 Faraday law of electromagnetic induction 通过回路所包围面积的磁感应通量发生变化时,回路中产生的感应电动势 E 与磁通量 Φ 随时间的变化率成正比。法拉第(Michael Faraday)电磁感应定律的数学表示式为

$$E=-\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}t}$$

式中的负号反映了感应电动势的方向与磁通量变化的关系。(人们常把此负号叫做楞次定律的数学表现)。

楞次定律 Lenz law 闭合回路中产生的感应电流的方向,总是使得它产生的穿过回路所包围面积的磁通量,补偿引起感应电流的磁通量的变化。楞次(Heinrich Friedrich Lenz)定律是能量守恒定律在电磁感应现象中的具体体现。楞次定律还可表述为:感应电流的效果总是反抗引起感应电流的原因。

动生电动势 motional electromotive force 动生电动势是导体或导体回路在磁场中运动时,在导体或导体回路中产生的电动势。动生电动势 E 的计算公式为

$$E=\oint_L(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

式中的 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是在导体上选取的线元,$\boldsymbol{B}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 处的磁感应强度,$\boldsymbol{V}$ 是线元 $\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 的运动速度。产生动生电动势的非静电力是洛伦兹力。

感生电动势 induced electromotive force 导体不动,仅由随时间变化的磁场激发的电动势叫感生电动势。感生电动势 E 的计算公式为

$$E=\oint_L\boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=-\oiint_S\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

式中的 S 是导体回路 L 所围的面积,$\mathrm{d}\boldsymbol{l}$ 是 L 上选取的线元,$\boldsymbol{B}$ 是磁感应强度,$\boldsymbol{E}$ 是由变化的磁场激发的电场,叫涡旋电场,它是一种非保守场。

涡旋电场 vortex electric field 变化的磁场在其周围空间激发的电场叫涡旋电场,即感生电场。涡旋电场是一种非保守场,其电场线是无始无终的闭合曲线。涡旋电场的场强 E 和磁感应强度 B 的关系为

$$\oint_L\boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=-\oiint_S\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$$

或

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$$

涡电流 eddy current 将导体放在交变磁场中时,变化的磁场在导体中激发起涡旋电场,涡旋电场驱使导体中的自由电荷运动而形成的电流叫涡电流,简称涡流,又叫傅科电流。

傅科电流 Foucault current 见“涡电流”。

涡流损耗 eddy current loss 由涡电流造成的焦耳热损耗叫涡流损耗。在某些场合,涡流损耗是非常有害的。例如,电机和变压器中的涡流损耗会使铁心发热,严重时甚至烧毁设备。因此,在这种情况下必须设法减小涡流损耗。另一方面,人们又在许多方面利用涡流的热效应,如,利用涡流的热效应制成的高频感

应电炉,广泛用于冶金工业和科学研究中。

电磁阻尼 electromagnetic damping 电磁阻尼是涡流机械效应的一种实际应用。当导体在磁场中运动而被激起涡流时,根据楞次定律,感应电流的效果总是反抗感应电流的原因,因此,运动导体将迅速停止下来。

趋肤效应 skin effect 当导体中有交变电流通过时,导体横截面上的电流分布并不均匀,导体表面处的电流密度大,导体内部的电流密度小。交变电流的频率越高,电流分布就越不均匀。例如:在微波频段(频率从 30MHz～30GHz),电流只在导体表面的一薄层内流动,导体内部没有电流流动。这种现象叫趋肤效应。造成趋肤效应的原因是:导体对电磁波有衰减作用,进入导体内部的高频电磁波迅速衰减,因而不能深入导体内部。

趋肤深度 skin depth 当导体中有交变电流通过时,会产生趋肤效应。若用 d 表示导体中某点距导体表面的深度,则导体中的电流密度 j 随深度 d 的变化规律为

$$j = j_0 e^{-d/d_s}$$

式中,j_0 是导体表面处的电流密度,d_s 是 j 等于 j_0/e 时 d 的值,把 d_s 叫做趋肤深度。理论计算表明,趋肤深度由下式决定:

$$d_s = \frac{503}{\sqrt{f\mu\sigma}}$$

其中的 f 是交变电流的频率,μ 是导体的相对磁导率,σ 是导体的电导率。由此可知,相同频率时,μ、σ 大的导体趋肤深度小;对同一种导体,频率越高,趋肤深度越小。

自感应现象 self-induction phenomenon 因线圈自身电流的变化,引起线圈的磁感应通量的变化,从而在线圈中产生感应电动势的现象叫自感应现象。

自感系数 coefficient of self-induction 线圈自身电流激发的磁场在线圈中形成的磁通叫线圈的自感磁通。在无铁磁质的情况下,线圈的自感磁通匝链数 Ψ 与线圈中的电流强度 I 成正比,即

$$\Psi = LI$$

比例系数 L 叫做线圈的自感系数,简称自感或电感。自感系数的大小仅与线圈的几何形状、匝数和周围介质的性质有关。自感系数的单位是 H。

自感电动势 self-induced electromotive force 因自感应而产生的感应电动势叫自感电动势。若线圈的自感系数 L 不随时间变化,则线圈中的自感电动势 E_L 与线圈中电流强度 I 随时间的变化率成正比,即

$$E_L = -L\frac{dI}{dt}$$

互感应现象 mutual induction phenomenon 因一个线圈中电流的变化,引起邻近另一线圈磁感应通量的变化,从而在另一线圈中激发起感应电动势的现象叫互感应现象。

互感系数 coefficient of mutual induction 1 线圈中电流的磁场在邻近 2 线圈中形成的磁通叫 2 线圈的互感磁通。在无铁磁材料的情况下,2 线圈的互感磁通匝链数 Ψ_{21} 与 1 线圈中的电流强度 I_1 成正比。同理,1 线圈的互感磁通匝链数 Ψ_{12} 与 2 线圈中的电流强度 I_2 成正比,即

$$\Psi_{21} = MI_1$$

$$\Psi_{12} = MI_2$$

比例系数 M 叫两线圈间的互感系数,简称互感。互感的大小仅与两线圈的几何形状、匝数、相对位置和周围介质的性质有关。互感系数的单位是 H。

互感电动势 mutual induced electromotive force 因互感应而产生的感应电动势叫互感电动势。若 1、2 两线圈的互感系数 M 不随时间变化,则 2 线圈中的互感电动势 E_2 与 1 线圈中电流强度 I_1 随时间的变化率成正比。同理 1 线圈中的互感电动势 E_1 与 2 线圈中电流强度 I_2 随时间的变化率成正比。即

$$E_1 = -M\frac{dI_2}{dt}$$

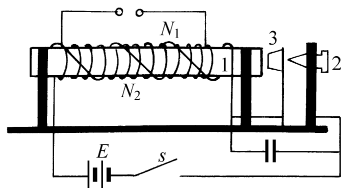
$$E_2 = -M\frac{dI_1}{dt}$$

耦合系数 coefficient of coupling 耦合系数 k 是描述两个线圈之间磁耦合程度的物理量。它的定义式为

$$k = \frac{M}{\sqrt{L_1 L_2}}$$

式中，M 是两线圈的互感系数，L_1、L_2 为两线圈各自的自感系数。k 等于 1 时，两个线圈处于全耦合状态，即两线圈之间的磁耦合过程无漏磁现象。

感应圈 induction coil 感应圈是利用互感应原理制成的能产生几万伏高压的装置，它的结构如图所示。在铁心 1 上绕有两个线圈，初级线圈 N_1 匝，次级线圈 N_2 匝，N_1 远小于 N_2。开始时可调螺钉 2 与簧片 3 相接触，合上电源开关 S，初级线圈中产生电流，电流的磁场使铁心磁化，吸引簧片 3，使簧片与螺钉脱开，初级线圈的电路被切断，铁心的磁性消失，簧片 3 又重新与螺钉 2 接触。初级线圈电路时断时通，使次级线圈中感应出几万伏的高电压。



自感磁能 magnetic energy of self-induction 在接有自感的电路里，电源克服自感电动势作功，这部分功以能量的形式储存起来，称之为自感磁能。如果自感线圈的自感系数为 L，线圈中的电流强度为 I，则自感磁能 $W_L=\frac{1}{2}LI^2$。

互感磁能 magnetic energy of mutual induction 在接有互感线圈的电路里，电源克服互感电动势作功，这部分功以能量的形式储存起来，称之为互感磁能。如果线圈的互感系数为 M，两线圈中的电流强度分别为 I_1、I_2，则互感磁能 $W_M=MI_1I_2$。

磁能密度 density of magnetic energy 磁能储存在磁场中。单位体积内的磁场能量叫磁能密度。磁场中某点的磁能密度 $w_m=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{H}$，其中 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别为该点的磁感应强度和磁场强度，磁场的总磁能 W_M 等于磁能密度对磁场所在空间 V 的积分，即

$$W_M=\iiint_V w_m \mathrm{d}v$$

四、电　路
Electric Circuit

电流 current 电荷的定向运动形成电流。通常情况下，产生电流必须具备两个条件：(1)存在可以自由移动的电荷；(2)存在电场。规定正电荷移动的方向为电流的方向。大小和方向不随时间变化的电流叫稳恒电流；大小和方向随时间作简谐变化的电流叫简谐交变电流。常把导体或半导体中的载流子在电场力作用下作定向运动形成的电流叫传导电流，电荷不是由电场力作用而在空间运动所形成的电流叫运流电流。另一种电流叫做位移电流，它不是电荷定向运动形成的，而是由随时间变化的电场激发的(见“位移电流”)。

稳恒电流 steady current 见“电流”。

电流强度 current intensity 描述电流强弱的物理量，常用字母 I 表示，它等于单位时间内通过导体任一横截面的电量。若 $\mathrm{d}t$ 时间内通过导体任一横截面的电量为 $\mathrm{d}q$，则导体中的电流强度为

$$I=\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$$

电流强度是标量，它的单位是 A。

电流密度 current density 电流密度是描述电流分布状态的物理量，常用字母 j 表示，它是一个矢量。导体中某点电流密度的方向即该点电流的方向，电流密度的大小等于通过该点与电流方向垂直的单位横截面的电流强度。空间分布的 j 构成一个矢量场，叫电流场。可用电流线直观形象地描述 j 的分布情况。电流线是在电流场中引入的一些假想曲线，曲线上每一点的切线方向即该点电流密度的方向，曲线稀疏的地方电流密度小，密集的地方电流密度大。通过导体中任意曲面的电流强度 I 与电流密度 j 的关系为

$$I=\iint_S \boldsymbol{j}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

电流密度的单位是 $\mathrm{A/m^2}$。

电流连续性方程 continuity equation of electric current 电流连续性方程是电荷守恒定律的数学表达式。方程的积分形式为

$$\oiint_S \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = -\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}$$

式中的 $\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 是电流场中任意闭合曲面 S 上的面积元，$\boldsymbol{j}$ 是 $\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 处的电流密度矢量，$\mathrm{d}q$ 是 $\mathrm{d}t$ 时间内 S 面里电量的增量。电流连续性方程的微分形式为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

式中的 ρ 是电荷体密度。

电流的稳恒条件 steady condition of current

电流的稳恒条件是

$$\oiint_S \boldsymbol{j} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s} = 0 \text{（积分形式）}$$

或

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \text{（微分形式）}$$

它表明：稳恒电流场中，流进和流出任一闭合曲面的电量相等。也就是说，稳恒电流场中的电流线是闭合曲线。

电源 electric source 电源是能将其他形式的能量转变为电能的能量转换装置。例如：干电池和蓄电池将化学能转变成电能，发电机将机械能转变为电能，太阳能电池将太阳能转变为电能等等。

电动势 electromotive force 电动势是表征电源做功本领的物理量，它是一个标量。一个电源的电动势 E 定义为在电源内部从负极到正极移动单位正电荷时，电源中的非静电力做的功。用公式表示即

$$E = \int_{-\ \text{电源内}}^{+} \boldsymbol{E}_k \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

式中的 $\boldsymbol{E}_k$ 是根据作功的非静电力定义的非静电场的场强。若非静电力存在于闭合回路之中，上式可以改写为

$$E = \oint_L \boldsymbol{E}_k \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

即电源的电动势等于非静电场的电场强度沿闭合回路的线积分。电动势的单位是 V。

恒压源 steady voltage source 恒压源即理想电压源，它是从实际电源抽象出来的一种模型。恒压源的内阻为零，端电压是定值，或是给定的时间函数，与流过它的电流无关。恒压源的电压是由它本身确定的，而流过它的电流由和它相联的外电路来决定。一个实际的电源可以等效为一个恒压源与电源内阻相串联的二端网络。

恒流源 steady current source 恒流源又叫理想电流源，它是从实际电源抽象出来的一种电源模型。恒流源是一种产生电流的装置。它产生的电流是定值，或是给定的时间函数，与其两端的电压无关。电流源的电流是由其本身确定的，而它两端的电压由和它相联的外电路来决定。一个实际的电源可以等效为一个恒流源与电源内阻相并联的二端网络。

电阻 resistance 不含电源的导体两端的电压跟通过它的电流强度之比叫这段导体的电阻，用字母 R 表示，它的单位是 Ω。导体电阻的大小取决于导体材料的性质和导体的几何形状。在一定温度下，截面均匀的导体的电阻与导体的长度 L 成正比，与其横截面积 S 成反比，即

$$R = \rho \frac{L}{S}$$

式中的比例系数 ρ 叫做导体的电阻率。

电阻率 resistivity 电阻率是表征物质导电性能的物理量，电阻率小的物质导电性好，电阻率大的物质导电性能差。电阻率用 ρ 表示，单位是Ω·m。一种材料的电阻率与材料的性质和温度有关。实验证明，当温度变化不大时，纯金属的电阻率与温度 t 的关系为

$$\rho = \rho_0(1 + \alpha t)$$

式中，ρ_0 是材料0℃时的电阻率，α 是材料的电阻温度系数。

电导 conductance 电阻的倒数叫电导，用 G 表示，单位是 S。

电导率 conductivity 表征物质导电性能的物理量，常用 σ 表示，它等于电阻率的倒数。金属导电的经典电子论认为，金属导体的电导率为

$$\sigma = \frac{ne\bar{\lambda}}{2m\bar{v}}$$

式中的 n 是金属导体中自由电子的浓度，e 是

电子的电量，m 是电子的质量，$\bar{\lambda}$ 是电子的平均自由程，$\bar{v}$ 是电子的平均热运动速率。电导率的单位是 S/m。电导率大的材料导电性能好，反之则差。

电阻的串联 series connection of resistance N 个电阻串联时的等效电阻等于各电阻之和；串联电路中每个电阻上的电流强度都相同；串联电路两端的总电压等于各个电阻两端电压之和；串联电路中每个电阻上分配的功率与电阻的阻值成正比。

电阻的并联 parallel connection of resistance N 个电阻并联时，总电阻的倒数等于各个电阻倒数之和；各个电阻两端的电压相等；通过并联电路的总电流强度等于通过各支路的电流强度之和，且电流的分配与电阻的大小成反比；并联电路中每个电阻上分配的功率与电阻的阻值成反比。

欧姆定律 Ohm law 通电导体的电流强度 I 与其两端的电压 V 成正比，跟它的电阻 R 成反比，即

$$I = \frac{V}{R}$$

这就是欧姆(Simon Georg Ohm)定律。常称之为部分电路欧姆定律。除此之外，还有一段含源电路欧姆定律和闭合电路欧姆定律。一段含源电路欧姆定律：含源支路起点和终点之间的电压降等于起点至终点路径上各电路元件两端电压降的代数和；闭合电路欧姆定律：任一闭合电路中，各电路元件上电压降的代数和等于零。

欧姆定律的微分形式 differential form of Ohm law 欧姆定律的微分形式给出导电物质中某点的电流密度 $\boldsymbol{j}$ 跟该点电场强度 $\boldsymbol{E}$ 之间的关系，它的数学表达式为

$$\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$$

式中的 σ 是导电物质的电导率。欧姆定律的微分形式既适用于稳恒电路，也适用于非稳恒电路。

电功率 electric power 电场力在单位时间内做的功叫电功率。电功率等于电路两端的电压 U 跟通过电路的电流强度 I 的乘积，它的单位是 W。

焦耳定律 Joule law 电流通过导体产生的热量 Q 跟电流强度 I 的平方、导体的电阻 R 及通电时间 t 成正比。这就是焦耳(Prescott James Joule)定律，其数学表示式为

$$Q = I^2 Rt$$

热量 Q 又叫焦耳热。

焦耳定律的微分形式 differential form of Joule law 焦耳定律的微分形式为

$$p = \sigma E^2$$

式中的 p 是单位体积导体的热功率，叫热功率密度，σ 是电导率，E 是电场强度。体积为 V 的通电导体的热功率为

$$P = \int_V p \mathrm{d} v$$

热功率密度 thermal power density 见“焦耳定律的微分形式”。

基尔霍夫电流定律 Kirchhoff current law 基尔霍夫(Gustav Robert Kirchhoff)电流定律可表述为：在任一时刻汇集于电路中任一节点的各支路电流的代数和等于零。其数学表示式为

$$\sum_i I_i = 0$$

这里规定：流进节点的电流强度为负值，流出节点的电流强度为正值。

基尔霍夫电压定律 Kirchhoff voltage law 基尔霍夫电压定律可表述为：在任一时刻，电路中任一回路的所有支路电压降的代数和等于零。其数学表示式为

$$\sum_i V_i = 0$$

电压降的正负号规定如下：选定回路绕行方向，电路中电源电动势的方向与回路绕行方向一致时，电动势为负，反之为正；电路中电阻上的电流流向和回路绕行方向一致时，电阻上的电压降为正，反之为负。

戴维南定理 Thevenin theorem 有源二端网络可用一个恒压源与一个电阻相串联的电路来等效，恒压源的电动势等于二端网络的开路电压，串联电阻等于二端网络中所有独立电源取零值(恒压源短路，恒流源开路)时网络端钮间的等效电阻。戴维南(Thevenin)定理又叫等效电压源定理。

诺顿定理　Norton theorem　有源二端网络可用一个恒流源与一个电阻相并联的电路来等效，恒流源的电流强度等于二端网络的短路电流，并联电阻等于二端网络中所有独立电源取零值(恒压源短路，恒流源开路)时网络端钮间的等效电阻。诺顿(Norton)定理又叫等效电流源定理。

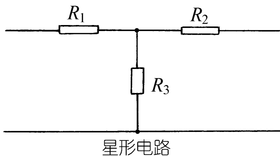
叠加定理　superposition theorem　在含多个电源的线性电路中，任一支路上的电流等于电路中各电源单独存在时在该支路上产生的电流之和。

星-三角变换　equivalent Y-△ replacement　星-三角变换又叫 T-Π 变换，是星形电路和三角形电路之间等效代换的一种方法。对如图所示的星形电路和三角形电路，从星形电路变成三角形电路的变换关系为

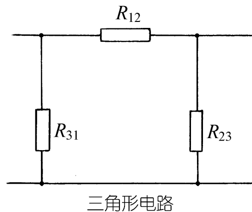
$$R_{12} = \frac{R_1 R_2 + R_2 R_3 + R_3 R_1}{R_3}$$

$$R_{23} = \frac{R_1 R_2 + R_2 R_3 + R_3 R_1}{R_1}$$

$$R_{31} = \frac{R_1 R_2 + R_2 R_3 + R_3 R_1}{R_2}$$



星形电路



三角形电路

从三角形电路变成星形电路的变换关系为

$$R_1 = \frac{R_{12} R_{31}}{R_{12} + R_{23} + R_{31}}$$

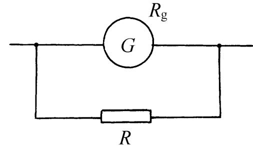
$$R_2 = \frac{R_{23} R_{12}}{R_{12} + R_{23} + R_{31}}$$

$$R_3 = \frac{R_{31} R_{23}}{R_{12} + R_{23} + R_{31}}$$

安培计　ampere-meter　安培计又叫安培表，是测量稳恒电流强度的仪表。在电流计两端并接一个分流电阻 R 就构成一个安培计(如图所示)。若希望安培计的量程为电流计满度电流的 n 倍，则并联电阻的大小为

$$R = \frac{1}{n-1} R_g$$

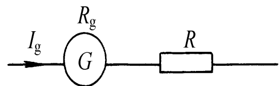
式中的 R_g 是电流表的内阻。安培表有正负极，使用时电流必须从表头的正极流入。



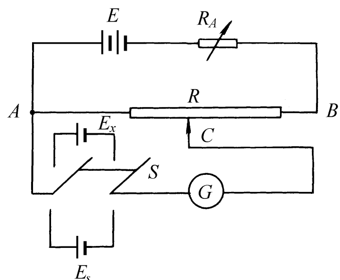
电压表　voltmeter　电压表也叫伏特计，是测量直流电压的电表。在一个电流计上串联一个高电阻 R 就构成一个伏特计(见图所示)。设电流计的内阻为 R_g，满度电流为 I_g，欲使伏特计的量程为 $I_g R_g$ 的 n 倍，必须串联的电阻的大小为

$$R = (n-1) R_g$$

伏特计有正负极，使用时正极必须接在电路中的高电位点。



电位差计　potentionmeter　电位差计是用补偿法准确测量电源电动势的仪器，其电路原理如图所示。E_x 是待测电动势，E_S 是标准电池的电动势。测量时先调节 R_A，在电路中建立



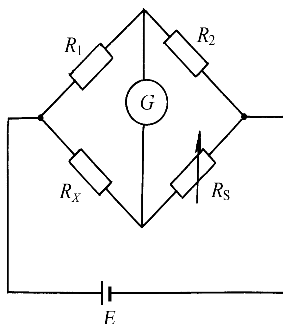
适当的电流，然后将开关 S 与标准电池连接，调节 R 使电流计 G 中无电流通过，这时 A、C 两点间的电阻记作 R_1。再将 S 与待测电池相连接，调节 R 使 G 中无电流通过，这时 A、C 两点间的电阻记作 R_2。待测电源的电动势

$$E_x = \frac{R_2}{R_1} E_S$$

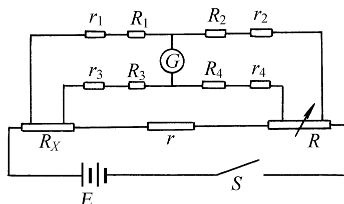
电位差计还可以用来测量电阻、电压和电流等。

惠斯通电桥 Wheatstone bridge 惠斯通(Charles Wheatstone)电桥是一种精确测量电阻的仪器。它测量电阻的原理如图所示，桥式电路中的 R_1、R_2 是已知电阻，R_S 是可调电阻，R_X 是待测电阻。选取 R_1 与 R_2 的适当比例，调节 R_X 使检流计 G 中无电流通过，电桥平衡，则待测电阻的值

$$R_X = \frac{R_1}{R_2} R_S$$



开尔芬电桥 Kelvin bridge 开尔芬(Lord Kelvin)电桥又叫双臂电桥，是一种可以测量 0.1 欧姆以下的低电阻的直流电桥。它的电路原理如图所示，R_3、R_4 是两个高电阻，R_X 是待测电阻，r_1、r_2、r_3、r_4、r 是连接导线的电阻和



接触电阻，调节 R、R_1、R_2、R_3、R_4 使电桥平衡，由电桥平衡条件可求得

$$R_X = \frac{R_1}{R_2} R \quad \frac{R_1}{R_2} = \frac{R_3}{R_4}$$

万用电表 multimeter 万用电表简称万用表，是一种多功能、多用途、多量程的测量仪表，可用它来测量电阻、电容、直流电流、直流电压、交流电流、交流电压等电学量。万用电表有指针式和数字式两种。任何型号的万用电表都是由表头、转换开关和测量电路三部分组成。表头经转换开关的转换，与不同的测量电路组成不同功能的测量仪表。使用万用电表时要注意：(1)在不知道待测量的大小时应首先选用最大量程档测量；(2)测量直流电压和直流电流时电表的极性不能接错；(3)用电阻档测电阻时，电阻上不能通有电流，也不能测量额定电流很小的电阻；(4)不使用时应将转换开关置于最大电压档。

接触电势差 contact potential difference 两种不同的金属相互接触时在它们之间产生的电势差。产生接触电势差的原因是：(1)两种金属电子的逸出功不同。(2)两种金属的电子浓度不同。若 A、B 两种金属的逸出功分别为 V_a 和 V_b，电子浓度分别为 N_a 和 N_b，则它们之间的接触电势差为

$$V_{ab} = V_a - V_b + \frac{kT}{e} \ln \frac{N_a}{N_b}$$

式中的 k 为玻尔兹曼(Boltzmann)常数，e 是电子电量，T 是金属的绝对温度。几种金属依次连接时，接触电势差只与两端金属的性质有关，与中间金属无关。

汤姆孙电动势 Thomson electromotive force 因金属导体上具有温度梯度，而在导体中产生的电动势叫汤姆孙(William Thomson)电动势。实验表明，汤姆孙电动势的非静电场 E_K 跟导体上的温度梯度成正比，即

$$E_K = \sigma(T) \frac{dT}{dl}$$

式中的 T 是绝对温度，$\sigma(T)$ 是金属材料的汤姆孙系数，它与金属材料的性质和温度有关。如果一金属棒两端的温度分别为 T_1、T_2，则金属棒上的汤姆孙电动势为

$$E(T_1, T_2) = \int_{T_1}^{T_2} \sigma(T)\mathrm{d}T$$

汤姆孙效应 Thomson effect　让金属棒两端维持不同的温度，当电流通过金属棒时，棒中除产生焦耳热外还会出现吸热或放热现象。电流从低温端流入高温端流出时，金属棒从外界吸收热量；电流从高温端流入低温端流出时，金属棒放出热量。这就是汤姆孙效应。

汤姆孙系数 Thomson coefficient　见“汤姆孙电动势”。

佩尔捷效应 Peltier effect　电流流过 A、B 两种不同金属的接触面时，接触处会发生吸热或放热现象。如果电流从 A 流向 B 时接触处吸热，则电流从 B 流向 A 时接触处放热。这种现象叫佩尔捷(Jean Charles Athanase Peltier)效应。

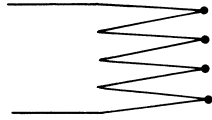
温差电动势 thermo-electromotive force　将 A、B 两种不同的金属构成闭合回路，当两种金属的接头处维持不同的温度 T_1、T_2 时，回路中会产生电动势，从而形成电流。这种电动势叫温差电动势，形成的电流叫温差电流。金属回路叫温差电偶或热电偶。实验表明，当温度的变化范围不大时，温差电动势 E_{AB}与温度差(T_2-T_1)的关系为

$$E_{AB} = a(T_2 - T_1) + \frac{b}{2}(T_2 - T_1)^2$$

式中的 a、b 是与金属性质有关的常量，可以通过实验测定。

温差电偶 thermo-couple　由两种不同的金属焊接起来、并使两焊接点处于不同温度的回路叫温差电偶或热电偶。温差电偶的主要用途是测量温度。它的特点是测量范围广(－200℃～2000℃)，灵敏度高，稳定性好，准确度高。常用的温差电偶有铜－康铜热电偶(测 300℃以下温度)、镍铝－镍铬热电偶(测 1300℃以下温度)、铂－铂铑热电偶(测 1700℃以下温度)、钨－钛热电偶(测 2000℃以下温度)。

温差电堆 thermo-pipe　将若干个温差电偶串联起来(如图所示)就构成一个温差电堆。温差电堆的温差电动势比温差电偶的大得多，可用它制成温差电池、温差电堆温度计、光辐射和红外辐射测量装置等。



气体导电 gaseous conduction　气体分子发生电离而导电的现象叫气体导电或气体放电。气体导电可分为自激导电和被激导电两种情况。被激导电是指气体在电离剂(紫外线、X 射线、火焰等)的作用下电离而导电的情况；自激导电也叫自持导电，是指气体因被击穿而导电的情况。自激导电时，即使撤除电离剂，导电过程仍然维持。参与自激导电的大量离子是由碰撞电离、二次电子发射、热电子发射等原因而形成。自激导电因条件不同会有不同的导电方式，可分为：辉光放电、弧光放电、火花放电和电晕放电等。

辉光放电 glow discharge　辉光放电是稀薄气体中的自激导电现象。其物理机制是：放电管两极的电压加大到一定值时，稀薄气体中的残余正离子被电场加速，获得足够大的动能去撞击阴极，产生二次电子，经簇射过程形成大量带电粒子，使气体导电。辉光放电的特点是电流密度小，温度不高，放电管内产生明暗光区，管内的气体不同，辉光的颜色也不同。正常辉光放电时，放电管极间电压不随电流变化。辉光放电的发光效应被用于制造霓虹灯、荧光灯等光源，利用其稳压特性可制成稳压管(如氖稳压管)。

弧光放电 arc discharge　弧光放电是在大电流作用下使气体击穿，产生高温，并出现弧光的气体放电现象。实验产生弧光放电的方法是将低电压大功率电源上的两电极短路后立即分开，短路电流产生的焦耳热使电极表面温度急剧升高，产生热电子发射，形成弧光放电。弧光放电过程中的大量导电离子主要来自电极的热电子发射，此外，还有离子碰撞电极产生的二次电子和场致发射的电子。弧光放电现象应用广泛，照明用的弧光灯、冶炼用的电弧炉、焊接用的电焊机都是基于弧光放电

原理制成的。但是在某些场合，弧光放电极其有害。如大电流电路中的开关断开时，产生的弧光会烧毁电器设备，必须采取灭弧措施。

火花放电 spark discharge 当高压电源的功率不太大时，高压电极间的气体在强电场的作用下被击穿，产生明亮、曲折、狭窄且有分叉的电火花，并伴随爆裂声，这种形式的自激导电叫火花放电。火花放电的击穿电压与气体的性质和压强、电极的形状和大小以及电极间距离等因素有关。雷电就是一种强大的火花放电现象。

电晕放电 corona discharge 当导体电极上有尖端或毛刺、且又远离其他导体时，尖端附近的强电场驱使气体中的残留离子高速运动，将气体分子碰撞电离，引起气体导电并发出晕光的现象叫做电晕放电。电晕放电是一种不完全的火花放电现象。当电极与周围导体间的电压增大时，电晕层逐渐扩大到其他导体，电晕放电就会过渡为火花放电。

逸出功 work function 逸出功又叫功函数或脱出功，是电子从金属表面逸出时克服表面势垒必须做的功。常用单位是电子伏特(eV)。金属材料的逸出功不但与材料的性质有关，还与金属表面的状态有关，在金属表面涂覆不同的材料可以改变金属逸出功的大小。例如：钨的逸出功为 4.52eV，表面涂钍后变为 2.63eV，涂铯后变为 0.71eV。

热电子发射 thermoelectron emission 当金属的温度升高时，金属中电子的动能随之增大，动能超过逸出功的电子数逐渐增加。温度升高到一定值(1000℃以上)时，大量电子从金属中逸出，这种现象叫热电子发射。热电子发射在无线电技术中有广泛的应用，各种电子管和电子射线管都是利用热电子发射来产生电子束的。

二次电子发射 second electron emission 用电子流或离子流轰击物体表面，使之发射电子的过程叫二次电子发射。发射的电子叫次级电子或二次电子。二次电子的数目取决于入射离子或电子的速度、入射角、物体的性质及物体表面的状态。

场致发射 field emission 在电极表面处的外加强电场的作用下，电子从电极表面逸出的现象叫场致发射或冷发射。发射的电子流密度与电极材料的性质、电场强度和电极表面的光滑度相关。

法拉第电解定律 Faraday law of electrolysis 法拉第电解定律有两条：法拉第电解第一定律和法拉第电解第二定律。法拉第电解第一定律：电解时极板处析出的物质的质量 m 跟通电时间 t 和电流强度 I 成正比(或者说跟通过的电量 q 成正比)，即

$$m = kIt = kq$$

式中的比例系数 k 叫做物质的电化当量，它在数值上等于通过 1 库仑电量时析出物质的质量，它的单位是千克/库仑(kg/C)。不同物质的电化当量不相同。法拉第电解第二定律：物质的电化当量 k 跟它的化学当量(M/n)成正比，即

$$k = \frac{M}{Fn}$$

式中的 M 是物质的摩尔质量，n 是化合价，F 叫做法拉第恒量，任何物质的 F 值都相同，等于 0.031772kg/mol。

交流电 alternating current 大小和方向随时间作周期性变化的电流叫交流电流，简称交流电。随时间作简谐变化的交流电叫简谐交流电或正弦交流电，可用正弦函数表示如下：

$$i = I_0\sin(2\pi ft + \phi) = I_0\sin(\omega t + \phi)$$

式中，i、I_0、f 和 ϕ 分别是正弦交流电的瞬时值、振幅(或最大值)、频率和初相位。$(2\pi ft + \phi)$ 叫做交流电的相位。它是决定交流电瞬时变化状态的物理量。$\omega = 2\pi f$ 叫正弦交流电的角频率。正弦交流电也可用复数表示，用 $\tilde{I}$ 表示复数电流(简称复电流)，则有

$$\tilde{I} = I_0 e^{j(\omega t + \phi)}$$

把复常数 $I_0 e^{j\phi}$ 叫做电流相量，它是复电流的核心部分，用 I 表示。相量是一个复数，可用复平面上的有向线段来表示。相量在复平面上的图示叫相量图。

交流电路 alternating current circuit 电源的电动势随时间作周期性变化，使得电路中的电压、电流也随时间作周期性变化，这种电路

叫做交流电路。如果电路中的电动势、电压、电流随时间作简谐变化,该电路就叫简谐交流电路或正弦交流电路,简称正弦电路。

交流电的振幅 amplitude of alternating current　见“交流电”。

交流电的有效值 effective value of alternating current　在两个相同的电阻 R 上分别通上交流电流 i 和稳恒电流 I,如果在交流电的一个周期的时间 T 内,两个电阻消耗的电能相等,则稳恒电流 I 等于交流电流 i 的有效值。交流电流 i 的有效值的定义式为

$$I=\sqrt{\frac{\int_0^T i^2 \mathrm{d}t}{T}}$$

即交流电流的有效值等于它瞬时值的平方在一个周期内的平均值的平方根。故有效值也叫方均根值。正弦交流电流的有效值等于其振幅的 $1/\sqrt{2}$ 倍。

交流电的周期 period of alternating current　交变信号重复一次所需的时间叫周期。常用字母 T 表示,单位是 s。周期是频率的倒数。

交流电的频率 frequency of alternating current　交变信号单位时间内循环的次数叫频率。常用字母 f 表示,单位是 Hz。频率是周期的倒数。把 $2\pi f$ 叫做信号的角频率,用字母 ω 表示,单位是 rad/s。

交流电的相位 phase of alternating current　见“交流电”。

阻抗 impedance　正弦交流电路中,二端网络端钮上电压的最大值(或有效值)与电流的最大值(或有效值)之比叫做该二端网络的阻抗,用字母 Z 表示,单位是 Ω。如果端钮上的电压和电流都用复数表示,则复数电压和复数电流之比叫二端网络的复数阻抗,简称复阻抗。复数阻抗的实部叫电阻(或有功电阻),用 r 表示,虚部叫电抗,用 X 表示。电容的电抗叫容抗,用 X_C 表示;电感的电抗叫感抗,用 X_L 表示。无源二端网络复数阻抗的模即二端网络的阻抗,其辐角是二端网络端钮上电压和电流之间的相位差。

电抗 reactance　见“阻抗”。

感抗 inductive reactance　电感的电抗即感抗。自感系数为 L 的电感线圈的感抗为 ωL,ω 是交流电的角频率。

容抗 capacitive reactance　电容的电抗即容抗。电容为 C 的电容器的容抗为 $-1/\omega C$,ω 是交流电的角频率。

导纳 admittance　阻抗的倒数叫导纳,常用字母 Y 表示,单位是 S。复数阻抗的倒数叫复数导纳。复数导纳的实部叫电导,用 G 表示,虚部叫电纳,用 B 表示。电容的电纳叫容纳,用 B_{C} 表示,电感的电纳叫感纳用 B_{L} 表示。

电纳 susceptance　见“导纳”。

交流电的瞬时功率 instantaneous power of alternating current　交流电的瞬时电压和瞬时电流的乘积叫交流电的瞬时功率。若交流电的电压和电流分别为

$$u(t)=U_0\cos(\omega t+\phi)$$
$$i(t)=I_0\cos\omega t$$

则交流电的瞬时功率为

$$\begin{aligned}p(t)&=u(t)i(t)\\&=U_0\cos(\omega t+\phi)I_0\cos\omega t\\&=\frac{1}{2}U_0I_0\cos\phi\\&\quad+\frac{1}{2}U_0I_0\cos(2\omega t+\phi)\end{aligned}$$

$p(t)$包含两项,第一项是与时间无关的常数项,第二项是以二倍频率(2ω)作周期变化的交变项。

交流电的平均功率 average power of alternating current　交流电的瞬时功率在一个周期内的平均值叫交流电的平均功率。设交流电的瞬时电压和瞬时电流分别为

$$u(t)=U_0\cos(\omega t+\phi)$$
$$i(t)=I_0\cos\omega t$$

则交流电的平均功率为

$$\begin{aligned}P&=\frac{1}{T}\int_0^T u(t)i(t)\mathrm{d}t\\&=\frac{1}{2}U_0I_0\cos\phi\\&=UI\cos\phi\end{aligned}$$

式中,U、I 分别为交流电的电压和电流的有效值,$\cos\phi$ 叫功率因数。交流电的平均功率也叫有功功率,它的单位是 W。

交流电的有功功率 active power of alternating current 见“交流电的平均功率”。

交流电的视在功率 apparent power of alternating current 交流电压和交流电流的有效值的乘积叫交流电的视在功率。常用 S 表示，单位为 V·A。电器设备铭牌上标明的容量即视在功率。

交流电的无功功率 reactive power of alternating current 如果交流电的电压和电流的瞬时值分别为

$$u(t)=U_0\cos(\omega t+\phi)$$

$$i(t)=I_0\cos\omega t$$

那么,交流电的无功功率为

$$Q=\frac{1}{2}U_0I_0\sin\phi=UI\sin\phi$$

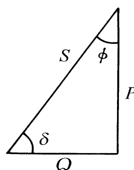
式中,U 和 I 分别是交流电的电压和电流的有效值。无功功率的单位是 Var。无功功率的大小表明电源和电路中电抗元件之间往返能量的大小。

功率因数 power factor 平均功率和视在功率的比值叫功率因数,即

$$\cos\phi=\frac{P}{S}$$

式中的 ϕ 是负载电路端钮上电压和电流的相位差,也叫功率因数角。对不含电源的负载电路,功率因数角等于电路的阻抗角。在电力系统中,提高负载电路的功率因数是一个十分重要的问题。提高负载电路的功率因数,可充分利用电源设备的供电能力,减少电路中因无功电流引起的焦耳损耗。

功率三角形 power triangle 有功功率 P、无功功率 Q、视在功率 S 和功率因数角 ϕ 之间的关系可用如图所示的三角形来形象地表示出来 ,这个三角形叫功率三角形。



有功电流 active current 设交流电的电流和电压分别为

$$i(t)=I_0\cos(\omega t-\phi)$$

$$u(t)=U_0\cos\omega t$$

利用三角公式可将 $i(t)$写作

$$i(t)=I_0\cos\phi\cos\omega t+I_0\sin\phi\sin\omega t$$

可以证明,上式右边的第一项对平均功率有贡献,把它叫做有功电流,第二项对平均功率无贡献,把它叫做无功电流。在相量图上,有功电流是平行于电压相量的那个电流分量,无功电流是垂直于电压相量的那个电流分量。

无功电流 reactive current 见“有功电流”。

损耗角 loss angle 二端网络端钮上交流电压和交流电流之间相位差角(即功率因数角)的余角叫损耗角,用 δ 表示。

损耗因数 loss factor 有功功率与无功功率之比定义为电路的损耗因数,它等于损耗角的正切 $\tan\delta$。由功率三角形可知

$$\tan\delta=\frac{\text{有功功率}}{\text{无功功率}}=\frac{P}{Q}$$

因此,损耗角或损耗因数越大,电路的损耗就越大。对于有耗电抗元件,损耗因数是其品质因数的倒数。

谐振电路 resonance circuit 在同时存在电容元件和电感元件的交流电路中,电流强度随频率不是单调变化的,当信号源的频率 f 等于或接近某个频率 f_0(电路的固有频率)时,电路中的电流强度和电路的总阻抗都取极值。这种现象叫做谐振。能发生谐振的电路叫谐振电路。电路发生谐振时的频率 f_0 叫谐振频率。谐振电路主要有串联谐振电路和并联谐振电路两种。R、L、C 串联连接成的电路是串联谐振电路;L 和 C 并联连接成的电路叫并联谐振电路。

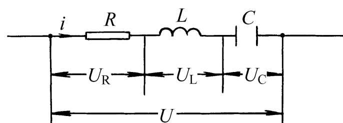
谐振频率 resonance frequency 见“谐振电路”。

串联谐振电路 series resonance circuit 如图所示的 R、L、C 串联连接成的电路叫串联谐振电路。串联谐振电路的谐振频率为

$$f_0=\frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}$$

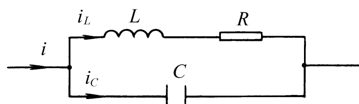
谐振时,电路呈纯电阻性,阻抗 Z 取极小值,且 $Z=R$,电路中的电流强度 I 取极大值,电容和

电感两端电压的相位相反，大小相等，都等于谐振电路两端总电压的 Q（Q 是谐振电路的品质因数）倍。



并联谐振电路 parallel resonance circuit 如图所示的 L、C 并联连接成的电路叫做并联谐振电路。并联谐振电路的谐振频率为

$$f_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{1}{LC} - \left(\frac{R}{L}\right)^2}$$



谐振时，电路呈纯电阻性，阻抗 Z 取极大值，电路中的电流强度 I 取极小值，流过电容和电感的电流相位相反，大小几乎相等，且等于外电路总电流的 Q（Q 是谐振电路的品质因数）倍。

品质因数 quality factor 品质因数又叫 Q 值，它是描述谐振电路储能效率的物理量。一个谐振电路的品质因数定义为

$$Q = 2\pi \frac{W_S}{W_R}$$

式中的 W_S 是电路谐振时所储存的能量，W_R 是在一个周期内电路所消耗的能量。Q 值越高，谐振电路的储能效率就越高。电抗元件的 Q 值定义为

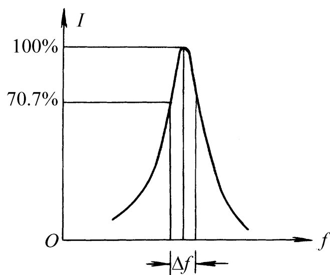
$$Q = \frac{\text{无功功率}}{\text{有功功率}}$$

可以证明，谐振电路 Q 值的倒数等于电容元件和电感元件 Q 值倒数之和，即

$$\frac{1}{Q} = \frac{1}{Q_C} + \frac{1}{Q_L}$$

通频带宽度 pass band-width of frequency 电流谐振曲线顶峰两边的曲线上，I 的值等于其峰值 $1/\sqrt{2}$ 倍的两点之间的频带宽度叫谐振电路的通频带宽度 Δf（见下图），简称通频带。通频带宽度越窄，谐振曲线就越尖锐，谐振电路的选择性越好。通频带宽度、谐振频率 f_0 和 Q 值三者有如下关系

$$\Delta f = \frac{f_0}{Q}$$



暂态过程 transient process 电路从一种稳定状态过渡到另一种稳定状态所经历过程叫暂态过程。例如：用阶跃电压激励 RC、RL 或 RLC 电路时，因为电容两端的电压不能跃变，电感的电流不能跃变，所以电路的响应不会立即达到稳定值，需要经过一个变化过程，逐渐趋于稳定值。这个变化过程即暂态过程。

时间常数 time constant 时间常数是表征暂态过程中，电路响应变化快慢的物理量，用 τ 表示，τ 具有时间的量纲，单位是秒。电路的时间常数越小，响应变化越快，反之越慢。RC 电路的时间常数 $\tau = RC$；RL 电路的时间常数 $\tau = L/R$。以 RC（或 RL）电路的零状态响应为例，响应衰减到稳态值的 1/e(0.368)所需的时间为 1 个 τ。

阻尼振荡 damping oscillation 使已经充好电的 R、L、C 串联电路短路放电（见图(a)），其电路方程为

$$LC\frac{d^2V}{dt^2} + RC\frac{dV}{dt} + V = 0$$

方程的解（即电路的响应）的形式与阻尼度 $\lambda = \frac{R}{2}\sqrt{\frac{C}{L}}$ 的大小有关。有如下三种情况：(1) R 较小（$R^2 < 4L/C$），$\lambda < 1$，电路有衰减振荡形式的响应

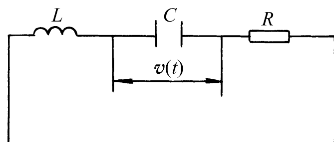
$$v(t) = V_0 e^{-\alpha t}\cos(\omega t + \phi)$$

这种形式的振荡叫做阻尼振荡（见图(b)）。阻

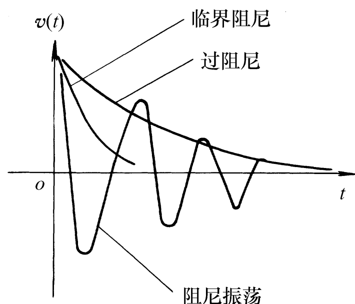
尼振荡的振荡频率为

$$f=\frac{\omega}{2\pi}=\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{1}{LC}-\frac{R^2}{4L^2}}$$

衰减系数 $\alpha=R/2L$；(2) $R^2=4L/C$，即 $\lambda=1$ 时，阻尼振荡频率变为零，周期为无穷大，电路响应变成非振荡衰减形式(见图(b))，它是阻尼振荡的临界状态，称之为临界阻尼情况；(3) R 较大($R^2>4L/C$)，$\lambda>1$，电路有非振荡衰减形式的响应(见图(b))，称之为过阻尼情况。



(a)



(b)

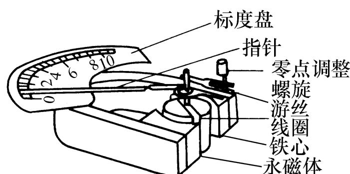
过阻尼 overdamping 见"阻尼振荡"。

临界阻尼 critical damping 见"阻尼振荡"。

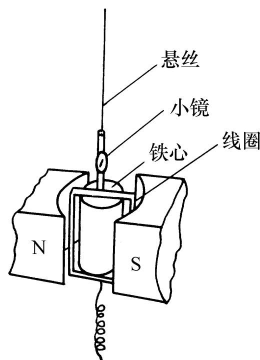
电流计 galvanometer 这里指的是指针式电流计，它的结构如图所示。在线圈中通上电流时，它同时受到磁力矩 L_C 和游丝的扭转力矩 L_d 的作用，$L_C=NISB$，$L_d=-D\theta$。两个力矩平衡时线圈静止，则

$$\theta=\frac{NSB}{D}I=S_I I$$

式中的 θ 是线圈转过的角度，N 和 S 分别是线圈的匝数和面积，B 是磁铁产生的磁场的磁感应强度，D 是游丝的扭转常数。S_I 称为电流计的灵敏度，其倒数叫做电流计常数，电流计常数越小，电流计越灵敏。被测电流的大小可以用 θ 的值来标度。



灵敏电流计 sensitive galvanometer 灵敏电流计是一种高灵敏度的磁电式电流计，可用它测量 $10^{-7}\sim10^{-11}$ 安培(A)的电流。它的原理性结构如图所示。当电流计的线圈中有电流



流过时，线圈受到磁力矩的作用而偏转，线圈同时受到悬丝的扭转力矩和由于电磁感应引起的电磁阻尼力矩的作用。在这三个力矩的作用下线圈的运动方程为

$$J\frac{d^2\Phi}{dt^2}+P\frac{d\Phi}{dt}+D\Phi=NSIB$$

式中的 J、Φ、N、S、I 分别是线圈的转动惯量、偏转角、匝数、面积和电流强度，D 是悬丝的扭转常数，B 是线圈处的磁感应强度，$P=(NSB)^2/R$ 是阻尼力矩的阻力系数，其中的 R 是线圈的电阻及外电路电阻之和。线圈有三种可能的运动状态：阻尼振荡运动状态(欠阻尼)、临界阻尼状态和过阻尼状态。实际应用时，必须使线圈工作在临界阻尼状态，这就要求阻尼度

$$\lambda=\frac{P}{2\sqrt{JD}}=\frac{(NSB)^2}{2R\sqrt{JD}}=1$$

线圈达到稳定时的偏转角 Φ_0 与电流强度 I 成

正比，即

$$\Phi_0 = \frac{NSB}{D} I = S_I I$$

式中的 S_I 称为电流计的灵敏度。灵敏电流计的指示系统是由悬丝上的反射镜和标尺组成（称为镜尺系统），用反射镜反射光斑到标尺上来读数。

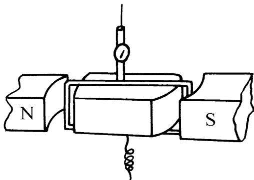
冲击电流计 ballistic galvanometer 冲击电流计的结构如图所示，它的特点是线圈扁且宽、转动惯量大，因此线圈的自由振荡周期较长。冲击电流计不是用来测量电流强度的，而是用来测量短时间内脉冲电流所迁移的电量的。可以证明，电量 q 与冲击电流计的冲掷角 Φ_M（在冲击电流计线圈中通上脉冲电流后，线圈的第一次最大的摆角）成正比，即

$$q = C_b \Phi_M \quad 或 \quad \Phi_M = S_b q$$

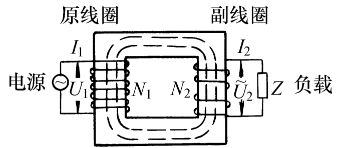
式中的 C_b 叫做冲击电流计的冲击常数，$S_b = 1/C_b$ 叫做电量灵敏度。它们与电流计的结构和电流计回路的电阻 R 有关。将一个探测线圈接在冲击电流计上，可以测量探测线圈所在处的磁感应强度的变化量 ΔB，ΔB 与 Φ_M 的关系为

$$\Delta B = \frac{C_b R}{NS} \Phi_M$$

式中的 N 和 S 分别为探测线圈的匝数和面积，R 是冲击电流计回路的电阻。



变压器 transformer 变压器是根据电磁感应原理制成的电磁装置，它可用来变换电压、电流、阻抗，也可用作耦合器件，它被广泛应用于电力系统和无线电技术中。变压器的原理性结构如图所示，在一个铁心上绕两个线圈就构成一个变压器。与电源相联的线圈叫原线圈（或原绕组、初级线圈），与负载相联的线圈叫副线圈（或副绕组、次级线圈）。交流电源在原线圈中激发交变电流，从而在铁心内产生交变磁通。耦合至副线圈的交变磁通在副线圈内产生感应电动势和感应电流，感应电流引起的磁通又反过来影响原线圈。这就是变压器的基本工作过程。



理想变压器 ideal transformer 理想变压器是从实际变压器抽象出来的一种模型，符合下列条件的变压器叫理想变压器：(1)没有漏磁，即原、副绕组每匝线圈的磁通量都一样；(2)两绕组没有电阻，从而没有焦耳热损耗；(3)铁心中没有磁滞损耗和涡流损耗；(4)原、副线圈的阻抗为无穷大，从而空载电流趋于零。

电压变比公式 voltage-ratio formula of transformer 理想变压器的电压变比公式为

$$\frac{\dot{U}_1}{\dot{U}_2} = -\frac{N_1}{N_2}$$

式中的 $\dot{U}_1$、$\dot{U}_2$ 分别为原、副线圈两端的复电压，N_1、N_2 分别为原、副线圈的匝数，负号表示 $\dot{U}_1$、$\dot{U}_2$ 之间有 π 的相位差。

电流变比公式 current-ratio formula of transformer 理想变压器的电流变比公式为

$$\frac{\dot{I}_1}{\dot{I}_2} = -\frac{N_2}{N_1}$$

式中的 $\dot{I}_1$、$\dot{I}_2$ 分别为原、副线圈中的复电流，N_1、N_2 分别为原、副线圈的匝数，负号表示 $\dot{I}_1$、$\dot{I}_2$ 之间有 π 的相位差。

空载电流 no load current 变压器副线圈中无电流（空载）时，原线圈中产生的电流叫空载电流，它由原线圈两端的输入电压和原线圈的自感系数决定。空载电流的作用是在铁心内激发一定大小的磁通量，故又叫励磁电流。理想变压器的空载电流为零。

反射阻抗 reflected impedance 设变压器原线圈中的电流为 $\dot{I}_1$、电压为 $\dot{U}_1$、空载电流为 $\dot{I}_0$，副线圈中的电流为 $\dot{I}_2$、负载阻抗为 $\dot{Z}_2$。把电流 $\dot{I}'_1 = \dot{I}_1 - \dot{I}_0$ 叫做反射电流，它与 $\dot{I}_2$ 成正比。原线圈的电压 $\dot{U}_1$ 与反射电流 $\dot{I}'_1$

的比值叫反射阻抗，即

$$\tilde{Z}'_1 = \frac{\tilde{U}_1}{\tilde{I}'_1}$$

反射阻抗与副线圈负载阻抗的关系为

$$\frac{\tilde{Z}'_1}{\tilde{Z}_2} = \left(\frac{N_1}{N_2}\right)^2$$

由此可知，变压器有变换阻抗的作用。

阻抗匹配 impedance matching 电源与负载间的最大功率传输条件是：负载阻抗等于电源内阻抗的共轭阻抗。利用变压器等阻抗变换器件来实现电源与负载间的最大功率传输就叫阻抗匹配。

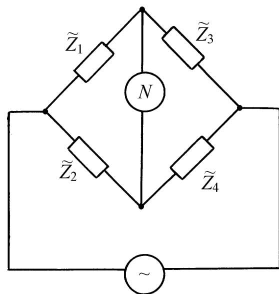
交流电桥 alternating current bridge 交流电桥是测量阻抗、电容、电感等参量的仪器，它的电路原理图如图所示。$\tilde{Z}_1$、$\tilde{Z}_2$、$\tilde{Z}_3$、$\tilde{Z}_4$ 是 4 个复阻抗，N 是电流指示器，流过 N 的电流为零时电桥达到平衡，4 个阻抗满足平衡条件

$$\frac{\tilde{Z}_1}{\tilde{Z}_2} = \frac{\tilde{Z}_3}{\tilde{Z}_4}$$

因为阻抗包含模量和复角两个参量，故交流电桥的平衡条件中包含两个方程，即

$$Z_1 Z_4 = Z_2 Z_3; \varphi_1 + \varphi_4 = \varphi_2 + \varphi_3$$

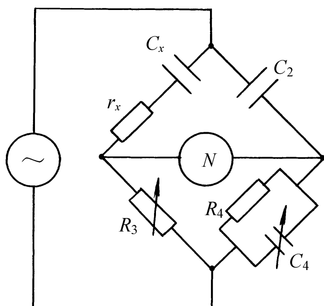
式中的 Z_1、Z_2、Z_3、Z_4 分别为 4 个复阻抗的模量，φ_1、φ_2、φ_3、φ_4 分别为 4 个复阻抗的辐角。因此，电桥中需要有两个可调参量，电桥平衡后可测得两个未知参量。



电容电桥 capacity bridge 电容电桥是用于测量绝缘材料的电容和损耗的交流电桥，其电路原理如图所示，r_x 和 C_x 是待测电阻和待测电容。调节 R_3 和 C_4 使电桥达到平衡，可求得：

$$r_x = \frac{R_3 C_4}{C_2},\ C_x = \frac{R_4}{R_3} C_2$$

材料的损耗为 $\tan\delta = \omega C_4 R_4$。保持 R_4、C_2 不变，调节 R_3、C_4 使电桥平衡，就可以分别读取 r_x 和 C_x 的值。



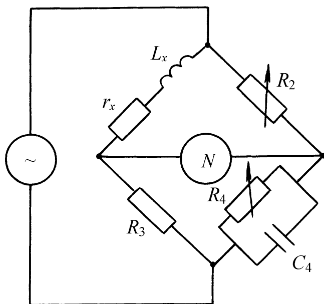
麦克斯韦 *LC* 电桥 Maxwell *LC* bridge 麦克斯韦 LC 电桥是用于测量电感元件的交流电桥，它的电路原理如图所示。r_x 和 L_x 是待测电感的电阻和自感系数。调节 R_2 和 R_4 使电桥达到平衡，根据平衡条件可得

$$r_x = \frac{R_2 R_3}{R_4},\quad L_x = C_4 R_2 R_3$$

因为电感的 Q 值为

$$Q = \omega C_4 R_4$$

所以，固定 R_3、C_4，调节 R_2、R_4，就可分别读取 L_x 和 Q 的值。



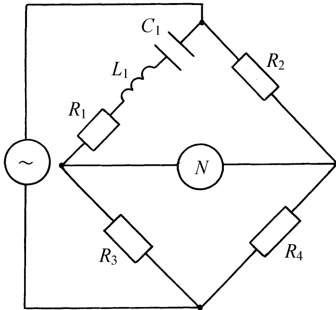
频率电桥 frequency bridge 频率电桥可用来测量电源的频率，它的电路原理如图所示。桥路的第一臂是一个串联谐振电路，谐振时电

桥的4个臂呈纯电阻性,故平衡条件和直流电桥相同。电桥的平衡条件为

$$\omega L_1 - \frac{1}{\omega C_1} = 0, \quad \frac{R_1}{R_2} = \frac{R_3}{R_4}$$

从上面的第一式可求得交流电源的频率

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{L_1 C_1}}$$



瓦特计(功率表) wattmeter 瓦特计是测量交流电路功率的仪表,它的主要部件是一个电阻很小的电流线圈和一个电阻很大的电压线圈,电流线圈固定不动,电压线圈可以转动并附有指针。测量时,电流线圈与负载串联,电压线圈与负载并联。在一个周期内,电压线圈所受的平均力矩 L 与负载的平均功率 P 成正比,据此可以测出负载的功率。

三相交流电 three phase current 由三相交流发电机的三个互成120°角的定子绕组感应产生的交流电叫三相交流电,简称三相电。它包含振幅相等、频率相同、相位差互为120°的三个单相正弦交流电。每一个绕组叫一相。简谐变化的三相电的瞬时电流可写作

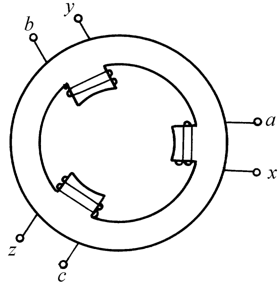
$$i_A = A_0 \cos \omega t$$

$$i_B = A_0 \cos\left(\omega t - \frac{2\pi}{3}\right)$$

$$i_C = A_0 \cos\left(\omega t + \frac{2\pi}{3}\right)$$

分别称它们为 A 相电流、B 相电流和 C 相电流。三相电压的瞬时值可用类似的方法表示。

三相四线制 three phase four wire system 三相交流发电机的三个定子绕组(见图)的末端 x、y、z 相联结后引出的导线叫中线,也叫零线。从三个定子绕组的始端 a、b、c 引出的导线叫相线,也叫火线。利用这四根导线向外供电的三相制叫三相四线制。



三相三线制 three phase three wire system 三相交流发电机的三个定子绕组的末端联结在一起,从三个绕组的始端引出三根火线向外供电、没有中线的三相制叫三相三线制。

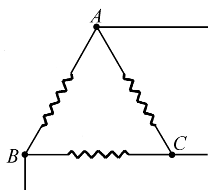
相电压 phase voltage 三相交流发电机每个定子绕组两端的电压叫相电压。在三相四线制中,相电压即火线与中线间的电压。

相电流 phase current 三相交流发电机每个定子绕组中的电流叫相电流。在三相四线制中,相线上的电流即相电流。

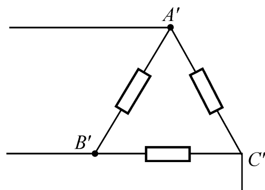
线电压 wire voltage 三相交流电路中两根相线之间的电压叫线电压。在三相四线制中,线电压等于相电压的 $\sqrt{3}$ 倍。

线电流 wire current 三相交流电路中相线上的电流叫线电流。在三相四线制中,线电流等于相电流。

三角形连接 triangle connection 可分为三相电源的三角形连接和三相负载的三角形连接。将三相交流发电机的三个定子绕组的始、末端顺次相接,再从各连接点引出三根火线,就构成一个三角形连接的三相电源(见图(a))在这种接法中,没有中线,线电压等于相电压。必须注意的是不能把绕组接反,否则将造成严重后果;如图(b)所示,将负载首尾顺次相连,再把连接点连到三根火线上就构成一个三角形连接的负载。这时,线电流等于每相负载电流的 $\sqrt{3}$ 倍。线电压等于相电压。

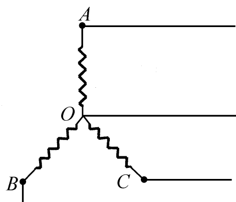


(a)

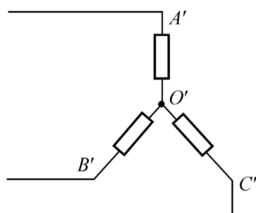


(b)

星形连接 star connection 可分为三相电源的星形连接和三相负载的星形连接。将三相交流发电机的三个定子绕组的末端相连接，再从始端引出三根火线，就构成一个星形连接的三相电源（见图（a））。在这种接法中，线电压等于$\sqrt{3}$倍相电压；如图（b）所示，将负载末端相连，首端连到三根火线上就构成一个星形连接的三相负载。这时，线电压是每相负载电压的$\sqrt{3}$倍。线电流等于相电流。



(a)



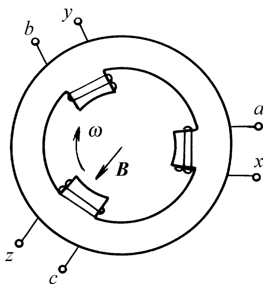
(b)

三相功率 three phase power 三相电路的功率等于各相电路功率之和。在对称负载情况下，不论负载是星形连接还是三角形连接，三相电路的平均功率为

$$P = 3\,UI\cos\phi$$

式中的 U、I 和 $\cos\phi$ 分别是一相电路中相电压的有效值、相电流的有效值和功率因数。负载对称时三相电路的总瞬时功率是不随时间变化的恒量，等于三相电路的平均功率 P。

旋转磁场 rotating magnetic field 如图所示，ax、by、cz 是结构相同、排列在圆周上、彼此差 120°角的三个线圈。把三相交流电通入三个线圈，线圈中的电流分别激发磁场。理论和实验证明，合磁场的磁感应强度是一个大小不变、以角速度 ω（三相交流电的角频率）匀速旋转的矢量。这就是旋转磁场。交换任意两相电流的输入端，磁场将反转。三相感应电动机就是利用这一原理制成的。



五、电磁学的单位制
Unit System of Electromagnetics

MKSA 有理制 rationalized MKSA system of units MKSA 有理制是国际单位制中关于电磁学的部分，也叫实用单位制。这种单位制的基本量是长度、质量、时间和电流强度，对应的基本单位是米、千克、秒和安培，其余电磁量的单位都是导出单位。在 MKSA 有理制中，真空介电常数 $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$法拉/米（F/m），真空磁导率 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$亨利/米（H/m）。

绝对静电单位制 absolute electrostatic system of units 绝对静电单位制简称静电单位制，也

叫 CGSE 单位制(或 e.s.u.)。这种单位制的基本量是长度、质量、时间,对应的基本单位是厘米、克、秒,其余电磁量的单位都是导出单位。导出单位没有特定的名称,都用 CGSE 或 e.s.u. 表示。在这种单位制中,介电常数是一个无量纲的纯数,真空介电常数 $\varepsilon_0=1$,真空磁导率 $\mu_0=1/c^2$,c 是真空光速。

绝对电磁单位制 absolute electromagnetic system of units 绝对电磁单位制简称电磁单位制,也叫 CGSM 单位制(或 e.m.u.)。这种单位制的基本量是长度、质量、时间,对应的基本单位是厘米、克、秒,其余电磁量的单位都是导出单位。磁感应强度的单位叫高斯,磁通量的单位叫麦克斯韦,磁场强度的单位叫奥斯特,其余导出单位没有特定的名称,都用 CGSM 或 e.m.u. 表示。在这种单位制中,磁导率是一个无量纲的纯数,真空磁导率 $\mu_0=1$,真空介电常数 $\varepsilon_0=1/c^2$,c 是真空光速。

高斯单位制 Gauss system of units 高斯单位制是一种混合单位制。在这种单位制中,所有电学量都用 CGSE 单位制量度,所有磁学量都用 CGSM 单位制量度。因此,只含电学量的公式与它们在 CGSE 制中公式的形式相同;只含磁学量的公式与它们在 CGSM 制中公式的形式相同。介质的介电常数和磁导率都是无量纲的纯数,真空介电常数和真空磁导率都等于 1。既含电学量,又含磁学量的公式中的比例系数必须用实验来确定。

安培 ampere 安培是国际单位制中电流强度的单位,国际符号为 A。安培的定义为:真空中相距 1 米的两无限长平行细导线内通有相等的稳恒电流时,若每米导线所受的磁场力正好等于 2×10^{-7}牛顿,则导线中电流的电流强度为 1 安培。

库仑 coulomb 库仑是国际单位制中电量的单位,国际符号为 C。当导体中通有 1 安培的稳恒电流时,在 1 秒钟内通过导体横截面的电量为 1 库仑。

伏特 volt 伏特是国际单位制中电势差(或电压)的单位,国际符号为 V。将 1 库仑的电量从电场中一点移至另一点,若电场力做的功是 1 焦耳,则两点间的电压为 1 伏特。即

$$1\text{ 伏特}=1\ \frac{\text{焦耳}}{\text{库仑}}$$

电动势、电势的单位也是伏特。

欧姆 ohm 欧姆是国际单位制中电阻的单位,国际符号为 Ω。当一段导体上的电流强度为 1 安培、导体两端的电压为 1 伏特时,这段导体的电阻为 1 欧姆。即

$$1\text{ 欧姆}=1\ \frac{\text{伏特}}{\text{安培}}$$

西门子 siemens 西门子是国际单位制中电导的单位,国际符号为 S。当一段导体上的电流强度为 1 安培、导体两端的电压为 1 伏特时,这段导体的电导为 1 西门子。电导的单位是电阻单位的倒数,即

$$1\text{ 西门子}=1\ \frac{\text{安培}}{\text{伏特}}=1\ \frac{1}{\text{欧姆}}$$

法拉 farad 法拉是国际单位制中电容的单位,国际符号为 F。如果电容器极板上的电量为 1 库仑,电容器两极板间的电压为 1 伏特,该电容器的电容为 1 法拉,即

$$1\text{ 法拉}=1\ \frac{\text{库仑}}{\text{伏特}}$$

亨利 henry 亨利是国际单位制中电感的单位,国际符号为 H。若电感器中的电流每秒钟变化 1 安培时,电感器中的感应电动势为 1 伏特,则电感器的自感系数为 1 亨利,即

$$1\text{ 亨利}=1\ \frac{\text{伏特}\cdot\text{秒}}{\text{安培}}$$

特斯拉 tesla 特斯拉是国际单位制中磁感应强度的单位,国际符号为 T。通有 1 安培稳恒电流的直导线置于均匀磁场中时,若每米直导线受到的最大磁场力为 1 牛顿,则此均匀磁场的磁感应强度为 1 特斯拉,即

$$1\text{ 特斯拉}=1\ \frac{\text{牛顿}}{\text{安培}\cdot\text{米}}$$

韦伯 weber 韦伯是国际单位制中磁感应通量的单位,国际符号为 Wb。韦伯是根据法拉第电磁感应定律来定义的。若回路中的感应电动势为 1 伏特,则与回路交链的磁通在每秒钟内的改变量为 1 韦伯。

高斯 gauss 高斯是高斯单位制中磁感应强度的单位,国际符号为 G。它与特斯拉的换算关系为

$$1\ 高斯 = 10^{-4}\ 特斯拉$$

奥斯特 oersted 奥斯特是高斯单位制中磁场强度的单位，国际符号为 Oe。在国际制中，磁场强度的单位是安培/米，奥斯特与它的换算关系为

$$1\ 奥斯特 = \frac{10^3}{4\pi}\ 安培/米$$

麦克斯韦 maxwell 麦克斯韦是高斯单位制中磁感应通量的单位，国际符号为 Mx。它与国际制中磁感应通量的单位韦伯的换算关系为

$$1\ 麦克斯韦 = 10^{-8}\ 韦伯$$

电子伏特 electron-volt 电子伏特是能量的单位，国际符号为 eV。1 个电子在 1 伏特电势差的两点间被加速所得到的能量为 1 电子伏特。1 电子伏特 $=1.6\times10^{-19}$焦耳。

国际单位和高斯单位之间换算关系表

（电磁学部分）

物理量	国际制量纲	高斯制量纲	单位换算关系 （国际制⟶高斯制）
电流强度 I	I	$L^{3/2}M^{1/2}T^{-2}$	$1A=3.0\times10^9$CGSE
电量 q	TI	$L^{3/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1C=3.0\times10^9$CGSE
电场强度 E	$LMT^{-3}I^{-1}$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1V/m=1/(3.0\times10^4)$CGSE
电位移 D	$L^{-2}TI$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1C/m^2=12\pi\times10^5$CGSE
极化强度 P	$L^{-2}TI$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1C/m^2=3\times10^5$CGSE
电位 U	$L^2MT^{-3}I^{-1}$	$L^{1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1V=1/300$ CGSE
电阻 R	$L^2MT^{-3}I^{-2}$	$L^{-1}T$	$1\Omega=1/(9.0\times10^{11})$ CGSE
电容 C	$L^{-2}M^{-1}T^1I^2$	L	$1F=9.0\times10^{11}$CGSE
磁感应强度 B	$MT^{-2}I^{-1}$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1T=10^4$G
磁场强度 H	$L^{-1}I$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1A/m=4\pi\times10^{-3}$Oe
磁感应通量 Φ	$L^2MT^{-2}T^{-1}$	$L^{3/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1Wb=10^8$Mx
磁化强度 M	$L^{-1}I$	$L^{-1/2}M^{1/2}T^{-1}$	$1A/m=10^{-3}$CGSM
电感 L	$L^2MT^{-2}I^{-2}$	L	$1H=10^9$CGSM

Optics
光　　学

光学 optics 光是电磁波,可见光是指波长在 380～760 nm 的电磁波。光学是研究光的传播及光与物质相互作用的学科。在光的传播方面,光学有两个分支:几何光学和波动光学。几何光学主要以光线为基础用几何学方法研究光的传播和成像规律。波动光学主要从波动性考虑光在传播时所发生的一些现象和规律,一般分成干涉、衍射、偏振。在光与物质相互作用方面,光学又有分子光学和量子光学两个分支,前者用经典理论进行研究,后者用量子理论进行研究。此外由于激光的出现、通信理论和新技术的介入,光学又有新的发展和新的分支,统称为近代光学,其中内容多种多样,如非线性光学、傅里叶光学、统计光学、二元光学、衍射光学、自适应光学等等。

一、几何光学
Geometrical Optics

光线 ray of light 光线是代表光能传播方向的几何线。它不同于方向垂直于光波波面的波线(波矢量)。在各向同性的媒质中,因两者方向相同,往往不加区别。而在各向异性的媒质中,两者明显不同,故不能混淆。在均匀的媒质中,光能以直线传播,可以用直线表示。在非均匀媒质中光能往往以曲线传播,此时光线不能用直线表示。

光的直线传播定律 law of rectilinear propagation of light 光在均匀媒质中按直线传播的规律。也正由于此规律,在几何光学中(均匀媒质)常用直线表示光线。

光的反射定律 law of reflection of light 光从一媒质射到与另一媒质的分界面时,一般情况下它将分解成两部分,一部分返回到原来媒质,另一部分进入第二媒质。返回到原媒质的光称为反射光,进入第二媒质的光称为折射光。反射光线与媒质分解面的法线构成反射角,入射光线与分界面的法线构成入射角。实验表明:①反射光线在入射光线与分界面的法线组成的平面内,且在法线的另一侧;②反射角等于入射角。光的反射定律就是指光反射时反射光的方向所服从这两方面规律的定律。从定律内容看,光的反射与媒质无关,与光的波长无关,从而可推得,凡是利用光的反射定律工作的元件,无色散现象。光的反射定律仅解决光反射时的方向问题,光反射时的能量分配问题则由菲涅耳公式解决(见“菲涅耳方程”)。

光的折射定律 law of refraction of light 当光从一个媒质射向另一媒质时,进入另一媒质的折射光与分界面的法线所构成的角称为折射角 i_2,入射光与分界面的法线构成的角称为入射角 i_1。

$$\frac{\sin i_1}{\sin i_2} = n_{12}(\lambda)$$

折射光的方向服从:①折射光在入射光与分界面的法线所组成的入射平面内;②折射角与入射角正弦之比与入射角无关。

比例常数 n_{12}称为第二媒质相对于第一媒质的折射率,是一与媒质和光的波长有关的常数。这些关系是斯涅耳根据实验确立的,又称为斯涅耳定律。任何媒质相对于真空的折射率称为该媒质的绝对折射率,又简称为折射率。实验表明两种媒质 1,2 的相对折射率 n_{12} 等于它们各自绝对折射率 n_1 与 n_2 之比:$n_{12} = n_2/n_1$。因而,折射定律第二部分内容就可以写成

$$n_1 \sin i_1 = n_2 \sin i_2$$

非常对称的形式。

斯涅耳定律 Snell's law 见“光的折射定律”。

光的折射率 index of refraction 见“光的折射定律”。

绝对折射率 absolute index of refraction 见“光的折射定律”。

相对折射率　relative index of refraction　见“光的折射定律”。

光程　optical path　表示光在媒质中传播距离 d 所需要的时间内，光在真空中所传播的距离

$$\Delta = \frac{d}{v}c = nd$$

其中 $n = c/v$ 为媒质的绝对折射率（简称折射率），v 为光在媒质中传播的速度，c 为光在真空中传播的速度。

费马原理　Fermat principle　光从一点通过任意一组媒质到达另一点时，光实际采用的路径是使此路径对应的光程为极值，即光沿光程为极值的路径传播，此原理就是费马原理。所谓极值，它有三种情况：极大、极小、稳定值。在多数场合下光程具有极小或稳定值，少数场合是极大值。如用数学语言表示，即

$$\delta\int_S^P n\,\mathrm{d}l = 0$$

就是在光线的实际路径上光程的变分为零。光的直线传播、光的反射和光的折射等定律都可由此原理推出。

光的可逆性原理　principle of reversibility of light　当光线的方向反转时，它将逆着同一路径传播，即沿原路径返回，这个带有普遍性的结论，称为光的可逆性原理。此原理可由几何光学的基本定律推出，如光的直线传播、反射定律和折射定律的对称形式中推出。可逆性对于每一反射面和折射面都适用，对很复杂的光学系统也适用。

临界角　critical angle　当光从折射率较大的媒质，入射到折射率较小的媒质时，发生全部反射时的最小的入射角，就是临界角。根据折射定律，当 $n_1 > n_2$，$i_2 = 90°$时的入射角即临界角：$i_c = \arcsin(n_2/n_1)$。

色散　color dispersion　由于光在物质中传播速度随波长而变，而折射率与光在物质中传播的速度有关，所以物质的折射率也随波长而变。这样，使入射的白光经过折射后，会产生分开的不同颜色的折射光，发生各色光的散开现象，此种现象称为色散。

正常色散　normal dispersion　它具有下列特点：(1)折射率随波长的减少而增加；(2)增加率随波长的减小而加大；(3)对某一给定波长，物质的折射率愈大的色散曲线愈陡。每一物质的色散曲线，一般不能用改变纵坐标比例的方法由另一物质的色散曲线得到。

反常色散　anomalous dispersion　当折射率与波长关系不同于正常色散的规律时，此种色散称反常色散。反常色散往往在材料的吸收区左右出现，在吸收区的长波边的折射率，比短波边的折射率要大，中间有明显的不连续。

柯西公式　Cauchy equation　这是一个由柯西(Cauchy)首先找到的代表正常色散曲线的公式：

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} + \frac{C}{\lambda^4}$$

其中 A、B、C 是表征任何一种物质特性的常数，可由三种不同 λ 的 n 值求得。

塞耳迈耶尔公式　Sellmeir equation

$$n^2 = 1 + \sum_i \frac{A_i\lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_i^2}$$

其中的 $\lambda_0, \lambda_1, \cdots, \lambda_i$ 是对应于各个可能的固有频率 ν_i 的光在真空中的波长 $\left(\lambda_i = \frac{c}{\nu_i}\right)$。此公式比柯西公式有改进，不但能描述正常色散，还能描述反常色散。

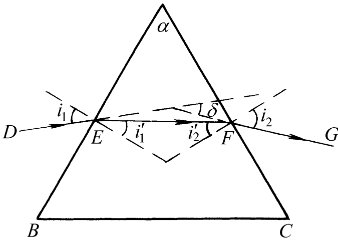
光学材料的色散本领　dispersive power of optical substance　材料的色散本领 V 定义为：$\frac{n_F - n_C}{n_D - 1}$，色散本领的倒数称为色散率 $v = \frac{n_D - 1}{n_F - n_C}$，式中 n_F, n_C, n_D 为材料对光波长各为 0.4869μm、0.6563μm、0.5892μm 的折射率。色散本领和色散率表征了光学材料的重要特性。

光学材料的色散率　dispersive index of optical substance　见“光学材料的色散本领”。

棱镜　prism　它是由光学材料组成的棱柱体，所有棱镜的折射面和反射面统称工作面，两工作面的交线称为棱，垂直棱的截面称为主截面。棱镜在光学中起着许多各不相同的作用，棱镜的组合可以用作分束器、起偏器等，但在大多数应用中，只是用了棱镜的色散功能，

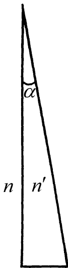
或使像的方向、光束传播方向发生改变的功能。色散功能使棱镜作为色散元件，如在分光计、摄谱仪、单色仪中的棱镜就是起着色散作用。在许多光学仪器中，往往利用棱镜使光路折叠，以使系统缩小体积，并且这些棱镜都没有色散，如反演棱镜、倒向棱镜等。

三棱镜 disperse prism 截面呈三角形的棱镜称作三棱镜。在与棱边垂直的主截面内，入射光线和出射光线之间的总偏折角度为棱镜的偏向角：$\delta = i_1 + i_2 - \alpha$，即偏向角 δ 随入射角 i_1 而变，可以证明：当 $i_1 = i_2$ 时，偏向角为最小，称为最小偏向角。在此情况下有 $n = \dfrac{\sin\left(\dfrac{\alpha + \delta_{\min}}{2}\right)}{\sin\dfrac{\alpha}{2}}$，在棱镜顶角 α 已知的情况下，通过棱镜对某一波长光的最小偏向角 $\delta_{\min}$ 的测量，便可求得棱镜材料对该波长的折射率。



最小偏向角 angle of minimum deviation 见"三棱镜"。

薄棱镜 thin prism or optical wedge 又名光楔，当三棱镜的顶角 α 很小时，顶角和偏向角的正弦，可认为与角度本身值相等，根据三棱

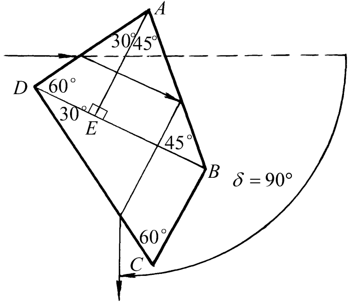


镜偏向角公式（见"三棱镜最小偏向角"）推得

$$\delta = \left(\frac{n'}{n} - 1\right)\alpha$$

其中 n' 和 n 分别是棱镜材料和周围媒质的折射率。在光学仪器中，常通过二光楔相对转动以产生不同的偏向角。

恒偏向棱镜 constant deviation prism Pellin-Bricu 棱镜是这类棱镜中最普通的，虽然是一块棱镜但可看成由两块 30°-60°-90°棱镜和一块 45°-45°-90°棱镜所组成，见下图。当光波长为 λ 的单色光，以平行于 DE 方向穿过棱镜。出射光和入射光总偏向角为 90°，实际上，

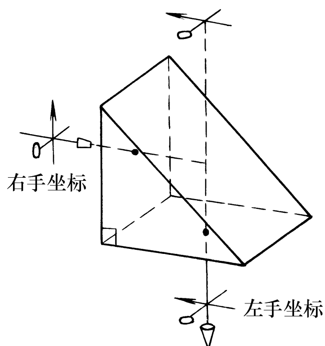


这条光线可以看做是以最小偏向角通过一块 60°棱镜（DAE 与 CDB 组合），而光束中其他波长的光，将以另外的角度射出。若把棱镜绕垂直纸面的轴稍微转动一点，那么进来的光束，将有一个新的入射角，于是另一个不同波长的光受到最小偏折，偏向角仍是 90°，这就是恒偏向这一名称的来源。用这样的棱镜，就能够方便地，以固定角度（90°）装置光源和观察系统，只要旋转棱镜就可以观察一些特定波长。

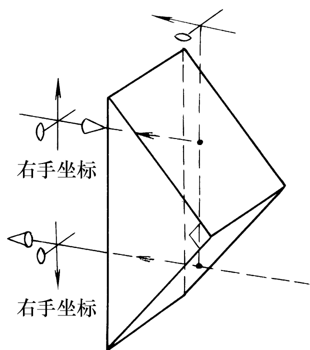
反射棱镜 reflecting prism 至少有一个工作面为反射面的棱镜，它常用来改变光束传播方向，或改变像的方向。若入射光束的所有光线，在反射面上的入射角大于临界角，光束发生全反射，这种棱镜称全反射棱镜。若入射角小于临界角，反射面上常镀以金属反射层来提高反射率。在这一类棱镜中，由于反射不产生色散，适当改变棱镜的形状是能够消除色差的。如主截面为等腰三角形的棱镜，将棱镜按反射面摊开，在截面上等价于一平行四边形，

出射光平行于入射光，出射光只决定于入射光的方向，与波长无关，所以是消色差的。另外有许多其他棱镜也能达到消色差，如直角棱镜、波罗棱镜、多夫棱镜、阿米西棱镜等。

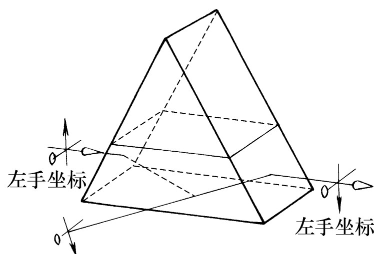
直角棱镜 rectangular prism 又名全反射棱镜，它是一种具有了两个45°角和一个90°角的玻璃棱镜，光通常垂直于一个较短的面入射，经斜面全反射，然后垂直于另一短面射出，光线偏转了一个直角。



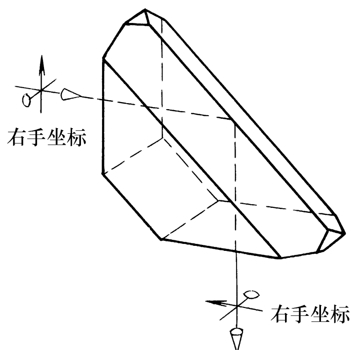
波罗棱镜 Porro prism 物理上与直角棱镜相同，不过是在不同方向上的使用。入射光束垂直于较长面入射，经两次反射后，光束偏转180°射出。



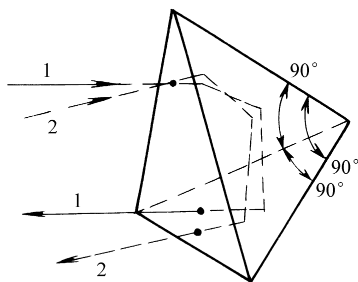
多夫棱镜 Dove prism 把直角棱镜截去直角端后的型式(用以减轻体积和重量)，使上下两条光线位置互相交换，所以又有倒向棱镜之称。此棱镜有一个有趣的性质：当棱镜绕光线方向旋转时，所成的像以二倍速度旋转。



阿米西棱镜 Amici prism（roof prism） 实质上是截断的直角棱镜，但在斜面上附加了一个屋脊形的部分。这种棱镜最普通的用途是把像沿中线切开并将左右两部分互换。



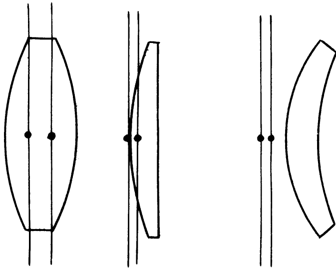
角锥棱镜(立方角棱镜) prism of corner cube 它是用一平面截得立方体的一角而成，切割平



面与此角相交的三个平面成等角。这种棱镜，具有使光线反向的功能，它会把所有的入射光线，都按它们原来的方向反射回去。

透镜 lens　从传统的意义讲，透镜是由两个或多个折射界面组成的光学元件，其中至少有一个界面是曲面。只有两个折射面的透镜称单透镜，由两个以上折射面组合的透镜，称复合透镜。按折射面的几何形状、结构和组合，透镜又可分为球面透镜、非球面透镜和胶合透镜；视其厚度在实际上能否忽略，可分为薄透镜和厚透镜；按聚光的能力，可分为会聚透镜和发散透镜。现代的透镜，往往在表面上镀上一层很薄的介质膜，以控制其透射特性。

会聚透镜 converging lens　对光线起会聚作用的透镜。当透镜的折射率大于透镜周围媒质时，凡中间厚边上薄的透镜，都有这种作用。其形状如图的三种透镜（从左到右为双凸形、平凸形、弯月形），又有正透镜或凸透镜之称。



发散透镜 diverging lens　对光线起发散作用的透镜，当透镜的折射率大于透镜周围的媒质时，凡中间薄边上厚的透镜都有此作用，如右栏上图中三种透镜（从左到右为双凹形、平凹、弯月形），又统称为凹透镜或负透镜。

弯月形透镜 meniscus lens　见“会聚透镜”，“发散透镜”。

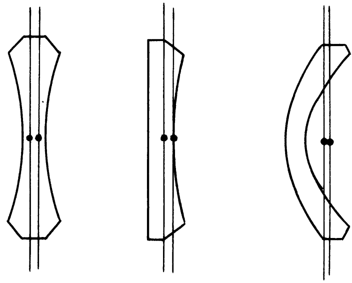
正透镜 positive lens　见“会聚透镜”。

负透镜 negative lens　见“发散透镜”。

凸透镜 convex lens　见“会聚透镜”。

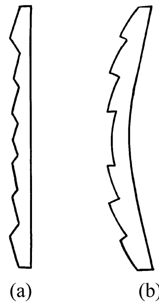
凹透镜 concave lens　见“发散透镜”。

菲涅耳透镜 Fresnel lens　又名罗纹透镜，是一种消球差的大孔径聚光镜。它分成平面

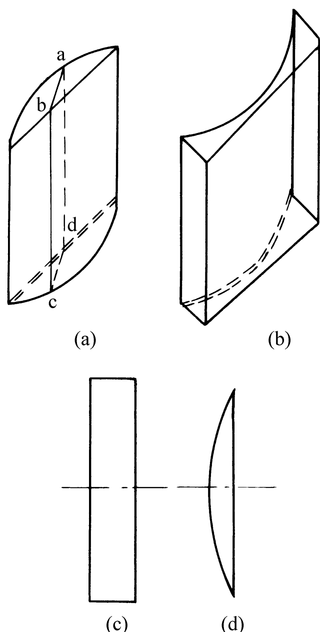


发散透镜

型(a)和弧面型(b)两种，平面型一面是平面，另一面是由曲率半径不同的球面组成的不连续阶梯面。弧面型一面是球面，另一面是由曲率半径不同的球面组成的不连续阶梯面。两类透镜根据球差矫正情况，阶梯面可由共轴球面系统或非共轴球面系统组成。这种光学元件具有聚光特性，但不能用作几何成像元件。其相对孔径可达 1∶1 或1∶0.8，与同样效果的其他透镜相比，重量大大减轻。



柱面透镜 cylindrical lens　至少有一个折射面是柱面的透镜。图中(a)为平凸圆柱透镜，(b)是平凹圆柱透镜。由于这种透镜的子午对称面(abcd)（图(a)）与弧矢对称面（与子午面垂直且通过母线中点的面）交线形状不同，一个是矩形（图(c)），一个是平凸透镜形（图(d)），所以在这两平面内，透镜对光束的作用不同，一个相当于通过平行平面板，一个相当于通过平凸透镜。因此柱面透镜可将同心光束变为像散光束。宽银幕电影的摄影镜头和放映物镜均为柱面组合透镜，柱面透镜还可校正人眼



的散光。

反射镜 mirror 它是一种利用反射定律工作的光学元件。反射镜按形状可分为平面反射镜、球面反射镜和非球面反射镜三种;按反射程度,可分成全反反射镜和半透半反反射镜(又名分束镜)。过去制造反射镜时,常常在玻璃上镀银,近来它蹬制作标准工艺是:在高度抛光的衬底上真空蒸铝后,再镀上一氧化硅或氟化镁,特殊应用中,由于金属引起损失可由多层介质膜代替。因反射定律与光的频率无关,此种元件工作频带很宽,可达可见光频谱的紫外区和红外区,所以它的应用范围愈来愈广。

平面反射镜 plane mirror 反射面为平面的反射镜,称平面反射镜。反射面可以是前表面,也可以是后表面。日常生活中用的镜子,其反射面是后表面,用于重要技术上的反射镜,大多数的反射面是前表面。光学中平面镜是惟一能成完善像的光学元件,它不改变光束的同心性质,经平面镜反射后,发散的同心光束仍是发散的同心光束,会聚的同心光束仍是会聚的同心光束,即实物得虚像,虚物得实像。由它反射所成的像与原物大小相等,且与镜面对称。实验室中常用平面镜来改变光线方向和放大或测量某些元件的微小转动(如电流计、电流秤)。

反演 inversion 在平面镜反射时,把物空间的右手坐标系变换为像空间的左手坐标系,这个过程称为反演。

球面反射镜 spherical mirror 它是指反射面是球面的反射镜。根据受光面的凹凸,分成凹面镜和凸面镜两种,两者的第一焦点都和第二焦点重合,凹面镜中焦点是实的。凸面镜中焦点是虚的。其成像公式是:$\frac{1}{s_i}+\frac{1}{s_o}=\frac{2}{r}$,$s_i$ 为像距,s_o 为物距,r 为曲率半径,三个量各以球面顶点为起点。凹面镜常用来聚光或成像,如幻灯机和放映机用它作聚光镜,一些反射式的望远镜用它作物镜。由于物在凸面镜前任何位置,所得到的都是缩小正立的虚像,所以凸面镜常用作汽车上的观察镜。

凸面镜 convex mirror 见“球面反射镜”。

凹面镜 concave mirror 见“球面反射镜”。

非球面镜 aspherical mirror 反射面不是平面、也不是球面的曲面镜。按形状可分抛物面镜、双曲面镜、椭球面镜、柱面反射镜和锥面反射镜。它们又根据受光面的凹凸,各分为凹凸两种。抛物面镜能将所有平行光轴的光束会聚到焦点,反之使从焦点发出的光线,经反射后成平行光束,所以常用于探照灯、汽车灯和一些大型反射式望远镜。椭球面能使从一个焦点发出的所有光线,经椭球面反射后,会聚于另一焦点,所以常用于固体激光器的聚光腔和大型望远镜的组合物镜。双曲面镜常用于缩短机身的聚光系统。用双曲面镜和抛物面镜组合的大型望远镜物镜,既可无色差,又可使球差、彗差达到最小,还可缩短镜筒长度。

同心光束 concentric light beam 各光线本身或其延长线交于同一点的光束,称为同心光束。在各向同性的媒质中,它对应于球面波。从一个点光源发出的光束便是同心光束。任一物点和一同心光束联系在一起,一光学系统能否成像,就看此光学系统对入射的同心光束能

否保持同心性，如能，就能成像，否则，就不能成像。

实物 real object 对光学系统来说，入射同心光束的顶点就是物点。如入射同心光束对光学系统是发散的，这些光线实在的交点就是实物。如入射同心光束对光学系统是会聚的，这个光束的顶点，是入射光线向前(光学系统)延长线的交点，是虚的，相应的物也就是虚物。

虚物 virtual object 见“实物”。

实像 real image 对光学系统来说，出射同心光束的顶点就是像点。如出射同心光束对光学系统是会聚的，顶点是实在光线的交点，相应的像是实像。如出射同心光束对光学系统是发散的，顶点是出射光线向后(光学系统)延长线的交点(虚的)，相应的像是虚像。

虚像 virtual image 见“实像”。

共轴球面系统 centered spherical system 由一个或多个折射或反射球面组成的光学系统。在这种系统中所有表面的中心都在一直线上，即所有表面对此直线是旋转对称的。这一直线也就是此系统的公共轴，或称为光轴，共轴球面系统也由此得名。

共轭点和共轭面 conjugate point and plane 对理想光学系统，空间每一个物点和相应的像点组成一一对应关系。根据光线可逆性原理，如果将发光点(物点)移到像点的位置上，并使光线沿反方向射入，它的像将成在原来物点的位置上。这样一对互相对应的点，称为共轭点，通过共轭点且垂直光轴的平面称为共轭面，相互对应的入射光线和出射光线，称为共轭光线。

笛卡儿符号规则 convention of Cartesian signs 在光学系统计算中，往往用正负数决定物、像相对某一点的位置和物、像的倒正，而公式的表达是与正负数决定的规则有关，所以在几何光学中，一定要对符号规则加以注意。一般中学教材中采用实正虚负的规则。笛卡儿符号规则采用的是在笛卡儿坐标系中决定正负的方法、距离测量以起点(光学系统中各量有一定的规定)为原点，在起点的右边为正，左边为负，向上为正，向下为负；角度测量的起始轴为光轴(或球面法线)，按小于$\frac{\pi}{2}$的方向旋转，顺时针为正，逆时针为负。此种规则不像实正虚负规则那样，要每一面讨论正负问题，而只要找到面与面之间转移关系，就可以很方便地用于多球面系统中的计算。

傍轴光线 paraxial rays 在共轴球面系统中，当光线的入射角充分小时，可认为其余弦值等于1，其正弦值和正切值与角度本身的值相等，满足这种条件的光线称傍轴光线又称近轴光线。这相当于在$\cos\phi$，$\sin\phi$展开式中

$$\cos\phi = 1 - \frac{\phi^2}{2!} + \frac{\phi^4}{4!} - \frac{\phi^6}{6!} + \cdots$$

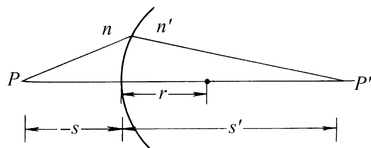
$$\sin\phi = \phi - \frac{\phi^3}{3!} + \frac{\phi^5}{5!} - \frac{\phi^7}{7!} + \cdots$$

仅取第一项的近似，也即一级近似。所以，根据此条件推得的公式和结论，有一阶光学、傍(近)轴光学或高斯光学的名称，而实际情况中对非傍轴光线所推的结果，往往与傍轴光线所推的结果有偏差。此种偏差统称为像差，将作为对实际系统质量的一种量度。

阿贝不变式 Abbe invariant 在近(傍)轴条件下，光经单球面折射时，有关物理量满足下列关系

$$n\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{s}\right) = n'\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{s'}\right) = c$$

其中 n、n'分别为物方空间和像方空间的折射率，r为折射球面的曲率半径，s和s'分别为入射光束顶点(物)、出射光束顶点(像)与球面顶点的距离，c为阿贝不变量，如图(采用笛卡儿符号规则，全用正量表示)。由此关系式可知，s与s'和角度无关，可推知在近(傍)轴条件下，入射同心光束经过折射后仍为同心光束，说明近(傍)轴条件下能成像，像的位置完全可由物的位置决定，近(傍)轴条件下所推得的结果，在像差理论中往往作为一个标准。



高斯成像公式 Gaussian imaging formula

$$\frac{f}{s}+\frac{f'}{s'}=1$$

其中 s、s'、f、f'各代表物距、像距、物方焦距、像方焦距，s、f 量的起点为第一主平面，s'、f'的起点为第二主平面，单球面折射时，两主平面重合在球面处。（采用笛卡儿符号规则决定正负）

牛顿公式 Newton formula

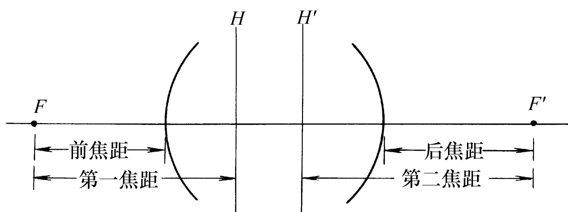
$$xx'=ff'$$

x、x'为物距、像距，其起点各为物方焦点和像方焦点，f、f'为物方焦距、像方焦距，起点各为第一主平面和第二主平面。（采用笛卡儿符号规则决定正负）

透镜的成像公式 object-image formula for lenses　见“高斯成像公式”。

透镜制造者公式 lens maker's formula　又称薄透镜公式：$\frac{1}{s_i}-\frac{1}{s_o}=(n-1)\left(\frac{1}{r_1}-\frac{1}{r_2}\right)$，$s_i$、$s_o$为像距、物距，$r_1$、$r_2$各为透镜第一面和第二面的曲率半径，$s_i$、$s_o$可以从透镜任意一个面或透镜中心量起。（采用笛卡儿符号规则决定正负）

焦点 focal point　一个光学系统有两个焦点：物方焦点和像方焦点。物方焦点是使像成在无穷远的物位置，像方焦点是物在无穷远处所成的像位置。两焦点的位置确定，有两种方法。一种是相对系统的第一面和最后一面而言的前焦距和后焦距，前焦距是物方焦点相对系统第一个面的距离，后焦距是像方焦点相对系统最后一面的距离。另一种方法是相对于系统的主平面，即所谓主焦距、物方主焦距或第一主焦距，是物方焦点相对于系统的第一主平面的距离，像方主焦距或第二主焦距，是像方焦点相对系统的第二主平面的距离。一系统的焦距值，往往是指主焦距值。垂直于光学系统的公共轴，并通过焦点的平面为焦平面，因为焦点有两个，所以焦平面也有两个：第一焦平面（物方焦平面）和第二焦平面（像方焦平面）。



焦距 Focal length　见“焦点”。

焦平面 Focal Plane　见“焦点”。

光焦度 focal power　又称焦度。它是光学系统会聚或发散光束本领的量度。其定义为：$\phi=\frac{n'}{f'}=-\frac{n}{f}$（笛卡儿符号规则时），$n$、$n'$各为系统的物方和像方的折射率，$f$、$f'$分别为系统的物方和像方的焦距。当焦距以米为单位时，光焦度的单位为屈光度或米的倒数。

屈光度 diopter　见“光焦度”。

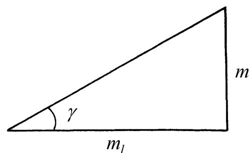
横向放大率 lateral magnification　在光学系统中，最后得到的像的横向大小和初始物体的横向大小之比，称为横向放大率：$m=\frac{y'}{y}=\frac{ns'}{n's}=-\frac{f}{x}=-\frac{x'}{f'}$，其中 y、y'各代表物、像的高度，n、n'各代表物方折射率，像方折射率，s为相对物方主平面的物距，s'为相对于像方主平面的像距，x 为相对于物方焦点的物距，x'为相对于像方焦点的像距。f，f'各为物方焦距、像方焦距（相对于各主平面）。一般情况下，当 m 为正时，物像方向相同，并且是一实一虚；m 为负时，物像方向相反，物像的实虚相同，即物是实的，像也是实的，物是虚的，像也是虚的。

轴向放大率 axial magnification　也称纵向

放大率，指的是光轴方向上的放大率：$m_l=\frac{\mathrm{d}x'}{\mathrm{d}x}$。它是像空间中一个无穷小的轴向长度，对物空间中相应长度的比例。利用牛顿公式，可得 $m_l=-\frac{x'}{x}=\frac{n'}{n}m^2$，式中 x 为相对第一焦点的物距，x' 为相对于第二焦点像距，n 为物方折射率，n' 为像方折射率，m 为横向放大率，由此公式可知在 $n>0$，$n'>0$ 时 m_l 总大于 0，说明物的移动和像的移动是同方向的，如物向右移动，相应的像也向右移动，仅在 $x=0$ 处有例外。

角放大率 angular magnification　一对共轭光线与光轴的夹角为 u、u'，两者正切之比叫做角放大率 $\gamma=\frac{\tan u'}{\tan u}$，当角度很小时，$\gamma=\frac{x}{f'}=\frac{f}{x'}=\frac{n}{n'}\frac{1}{m}$，式中 x、x' 代表共轭光线与光轴的交点，相对于物方焦点、像方焦点的距离，f、f' 各代表物方焦距和像方焦距。对于给定的两种媒质，对近轴光线，γ 与 m 成反比，即角放大率和横向放大率成反比。在像放大时，成像光束是缩小的。在像缩小时，成像光束是放大的。

放大率三角形 magnification triangle　在傍轴光线范围内，横向放大率 m、轴向放大率 m_l 和角放大率 γ，三者之间关系为 $m=m_l\gamma$。此关系式也可用一个三角形表示，见图。此三角形，形象地表示了三个放大率之间关系，所以称为放大率三角形。



共轴光学系统的基点 cardinal point of coaxial optical system　一般指六个点，两个焦点即物方焦点（第一焦点）与像方焦点（第二焦点）、两个主点（物方和像方）、两个节点。其中两个主点，指线放大率为 1 的两个共轭点，主平面是横向放大率为 1 的两个共轭平面。节点指轴向角放大率为 1 的两个共轭点。两个焦点（见[焦点和焦距]）是基点中惟一不共轭的两个点。当系统前后的媒质相同时，主点与节点重合，否则不重合。基点对光学系统很重要，有了系统基点后，系统成像才可采用由单球面折射推得的高斯公式、牛顿公式、简单作图法和相应的放大率公式，求得理想系统像的位置与大小的一级近似结果。所以基点的求得也显得非常重要，一般有公式计算和作图两种方法。

负主点 negative principle point　又称反主点。共轴球面系统中，横向放大率为 −1 的两共轭点。

负节点 negative nodal point　又称反节点。共轴球面系统中，角放大率为 −1 的两共轭点。

亥姆霍兹公式 Helmholtz formula　对单个折射面球面有 $yn\tan u=y'n'\tan u'$，此式称为亥姆霍兹公式。它是折射球面能使空间所有点，以任意宽广光束成像的必要条件。在傍轴区域内 $\tan u\approx u$，上式化简为拉格朗日-亥姆霍兹定理：$ynu=y'n'u'$。

透镜的光心 optical center of lens　光心是透镜中的一个特殊点，所有经过透镜后不改变方向的光线，必定通过此点（光心）。即平行于入射光线的出射光线，在透镜中必定经过透镜的光心。光心的位置，决定于透镜两球面的曲率半径和透镜厚度，它不随光的波长而变化，在薄透镜中，光心与镜心重合。

光线矩阵 ray matrix　在近轴范围内，任何一条光线的位置和方向，可由两个参数，光线离开光轴的距离 y 和光线和光轴的夹角 α 确定。当光线在光学系统中传播时，这两个参数在变，而这种变化可以很方便地用下列矩阵形式表示：$\begin{bmatrix} y_2 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ \alpha_1 \end{bmatrix}$。由 y 和 α 构成列矩阵 $\begin{bmatrix} y_1 \\ \alpha_1 \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} y_2 \\ \alpha_2 \end{bmatrix}$ 称为光线矢量，它表征光线的特征。变换矩阵 $\begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}$ 称为光线矩阵。它以一种简洁的方式表征一条光线，在通过一个光学表面或光学元件或一段空间时所经受的变化。在下面的表中列出几种光线矩阵。用矩阵乘法可以很容易地处理光学元件的组合问题。如各光学元件的光线

矩阵为 $\boldsymbol{m}_0$、$\boldsymbol{m}_1$、$\boldsymbol{m}_2$、…，$\boldsymbol{m}=\cdots\boldsymbol{m}_2\boldsymbol{m}_1\boldsymbol{m}_0$，$\boldsymbol{m}$ 为系统矩阵。由组合元件的系统矩阵可以很容易求出组合元件的焦距和主点。

光通过	光线矩阵	又名	注释
均匀媒质自由传播	$\begin{bmatrix}1 & d\\0 & 1\end{bmatrix}$	传播矩阵	d 为传播距离
平面折射	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & \dfrac{n_1}{n_2}\end{bmatrix}$	平面折射矩阵	n_1、n_2 各为平面两边的折射率
球面折射	$\begin{bmatrix}1 & 0\\\dfrac{1}{r}\left(\dfrac{n_1}{n_2}-1\right) & \dfrac{n_1}{n_2}\end{bmatrix}$	球面折射矩阵	r 为曲率半径，凸面：$r>0$；凹面：$r<0$

光线矢量 ray vector　见“光线矩阵”。

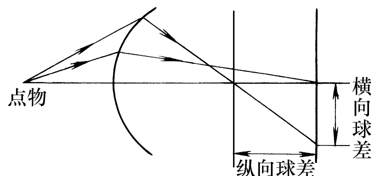
光线追迹法 ray tracing method　在实际处理光学系统成像问题（光学设计）时，最直接的方法是把折射定律准确地应用于每一个折射面，追迹具有代表性的光线通过光学系统的准确路径。其方法一般有两种：一种是光学图解法；一种是计算法。后者由于计算机的发展、普及已普遍应用，有专门的应用程序并配以立体显示，可以说完全替代了前者，已成为当今光学设计的主要工具和方法。

像差 aberration　实际光学系统中，对非傍轴光线追迹所得的结果和傍轴光线追迹所得的结果不一致，这些与高斯光学（一级近似理论或傍轴光线）的理想状况的偏差，叫做像差。像差一般分两大类：色像差和单色像差。色像差简称色差，是由于透镜材料的折射率是波长的函数，由此而产生的像差。它可分位置色差和放大率色差两种。单色像差是指即使在高度单色光时也会产生的像差，按产生的效果，又分成使像模糊和使像变形两类。前一类有球面像差、彗形像差和像散。后一类有像场弯曲和畸变。

三级像差理论 third-order theory of aberrations　在光线追迹公式中，若把角的正弦函数，用其展开式的前两项替代，例如用 $\theta-\dfrac{\theta^3}{3!}$ 替代 $\sin\theta$，相对于一级近似中的一项替代，多了幂级数中的三次方项 θ^3，由这种方法获得的像差理论，称为三级像差理论。在这个理论中，任何光线所产生的像差，是相对一级近似理论的偏差，可以用五个和式（s_1 到 s_5）来表示，这五个和叫做赛德尔和。如果一个透镜无缺点成像，则这五个和都应当为零。若轴上一已知物点的赛德尔和 $s_1=0$，则相应的球差不存在。如 $s_1=0$ 和 $s_2=0$ 则系统没有球差，也没有彗差。如果 $s_1=0$ 和 $s_2=0$，还有 $s_3=0$ 和 $s_4=0$ 则所成的像除无球差、彗差外，也没有像散和像场弯曲。最后若 s_5 也为零，则也没有像的畸变。这五种像差，通常又叫做赛德尔像差或初级像差。

高级像差 higher order aberration　精确的光线追迹结果和三级近似之间的差异称为高级像差。

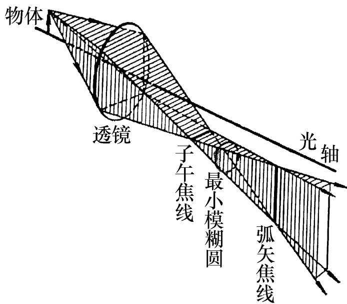
球面像差 spherical aberration　当球面孔径较大时，轴上物点发出的光束，经球面折射后不再交于一点，见图，这种现象称为球面像差，简称为球差。傍轴光线和非傍轴光线交点不同，边缘光线的交点和傍轴光线交点的距离差为纵向球差。边缘光线在傍轴光线的焦面上的交点，与光轴的距离为横向球差（见图）。纵向球差又按边缘光线交点，在傍轴光线交点的左右分成正球差和负球差。典型的双凸透镜



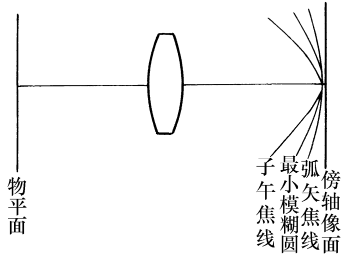
有正的纵向球差，双凹透镜有负的纵向球差，所以由凹凸两透镜胶合而成的透镜，可以减小球差。一般可改变透镜两球面的曲率半径(又称配曲调正)以减小单透镜的球差，也可用渐变折射率的材料制作透镜，以消除球差。

彗形像差 coma aberration 傍轴物点发出的宽阔光束，经光学系统后，在像平面上不再交于一点，而形成如彗星状的亮斑。这种像差称为彗形像差，或简称彗差。由于它是不对称的似彗星般的尾巴，常被认为是一切像差中最坏的一种。用改变透镜两球面的曲率半径，可减小透镜的彗差。光学系统中的彗差，也可通过在适当的位置使用光阑来消除。

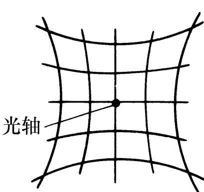
像散 astigmatism 当物点离开光轴较远时，入射光束将不对称地射到透镜上，所引起的第三种初级像差，叫做像散。此时出射光束将不是同心光束，光斑一般呈椭圆形，但在两个位置退化为直线，称为散焦线。两散焦线互相垂直，分别称为子午焦线和弧矢焦线。在两焦线之间，某个地方光束的截面呈圆形，称为最小模糊圆(circle of least confusion)，可以认为是光束聚焦最清晰的地方，是放置照相底片或屏幕的最佳位置。像散现象需通过复杂的透镜组来消除。



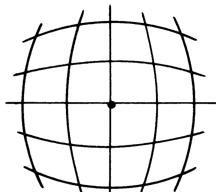
像场弯曲 curvature of field 对于物平面所有的点，散焦线和最小模糊圆的轨迹一般是曲面，这现象(见图)称为像场弯曲，又称珀兹瓦尔(Petzval)像场弯曲。对于单透镜可通过在透镜前适当位置上放一光阑来矫正。

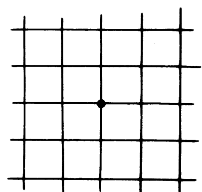


畸变 distortion 畸变是由于光束倾斜度较大而引起的。与球差、彗差和像散不同，每一像点仍然是尖锐地聚焦，只是横向放大率 M 是像点与光轴的距离 y 的函数，这种像差表现为像的整体走样。当横向放大率随 y 增大而增大时，为正畸变或枕形畸变，当 M 随 y 增大而减小时，为负畸变或桶形畸变。图(c)为网状物，图(b)为负畸变或桶形畸变，图(a)为正畸变或枕形畸变。正、负畸变的位置与光阑位置有关，如凸透镜，光阑放在透镜前产生负畸变，放在透镜后产生正畸变，所以在照相机的对称镜头中，往往将光阑放在一对相同透镜的中间，这样可以使两种相反的畸变互相抵消。



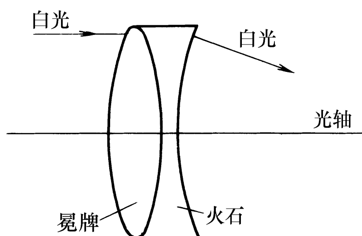
(a)


(b)


(c)

色像差 chromatic aberration 由于光学材料的折射率随光的颜色(波长)而变，不同颜色

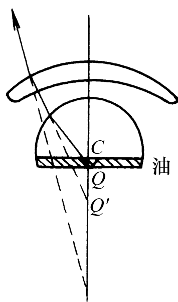
的光，经过透镜后所成的像，无论位置和大小都可能不同，前者称位置色差（轴向色差），后者称放大率色差（横向色差）。校正色差的方法有好几种，用一个冕牌玻璃透镜和一个火石玻璃透镜组成的双胶合透镜，是最常用的消色差透镜（见图），其中冕牌玻璃透镜具有较大的正光焦度，火石玻璃透镜具有较小的负光焦度，但它们的色散相等。因此，这种双胶合透镜的光焦度为正，色散互相抵消，使各色光近似地共焦。消色差的另一方法是用同样材料制成的两透镜，它们之间的距离，恰好等于两焦距和的一半。很多仪器就采用此种分离型双透镜作目镜，因焦距不变，又能使横向色差得到很好的校正，视角放大率仅与焦距有关，所以不同颜色的像看起来是重叠的。



不晕系统　aplanatic system　一个既无球差又无彗差的光学系统叫做不晕系统。

阿贝正弦条件　Abbe sine condition　$ny\sin u = n'y'\sin u'$，这个公式称为阿贝（Abbe）正弦条件。式中 n、n'是物方，像方的折射率，y、y'是物高、像高，u、u'为物方和像方光线的倾斜角。它是在轴上已消除球差的前提下，傍轴物点以大孔径的光束成清晰像的充分必要条件，又称光学正弦定理。

不晕点　aplanatic points　在光轴上已消除球差，且满足阿贝正弦条件的共轭点，叫做不晕点，又称齐明点或等光程点。单个折射面有一对齐明点，其中实物点 Q 到球心 C 的距离 $QC=(n'/n)r$，虚像点 Q'到球心的距离 $Q'C=(n/n')r$，这里 r 为球面半径，n、n'为物方折射率和像方折射率。显微镜的油浸物镜就是利用了这一原理。



齐明点　aplanatic foci　见“不晕点”。

波像差　wave aberration　点物经理想光学系统后成点像，与它相应的球面波经理想光学系统后，仍为球面波。但由于实际光学系统有像差，通过它的球面波要变形，变了形的实际波面与理想球面波有差别，这两个波面之间的光程差称波像差。如物点发出的光线与在出瞳中心的实际波面与理想球面波的交点分别为 Q、Q'，距离 QQ'与此空间的折射率的乘积 $n(QQ')$，就是波面上 Q 点的波像差。它与几何像差有直接关系，利用此关系可解决像差的校正和容限问题。普通仪器的波像差可大到 40 或 50 个波长，但在比较精密仪器中（如天文望远镜或显微镜）波像差必须减小到 1 个波长的几分之一。

光阑　stops　顾名思义，凡在光学系统中对光束起着限制作用的实物都是光阑。它可以是透镜的边缘、框架或特别设置的带孔屏。其作用可分两方面，限制光束或限制视场（成像范围）大小。光学系统中限制光束最多的光阑，称为孔径光阑，限制视场（大小）最多的光阑，称为视场光阑。由上可知，孔径光阑和视场光阑两者都是实物。决定光学系统的孔径光阑的一般规则是：从物点看光阑或光阑的像，由其中张角最小的那一个，来决定光学系统的孔径光阑。如果张角最小的是某光阑的像，则该光阑本身就是孔径光阑。

孔径光阑　aperture stops　见“光阑”。

视场光阑　field stops　见“光阑”。

入射光瞳　entrance pupils　孔径光阑对它前面（物方）的光学元件所成的像，称为入射光瞳。出射光瞳是孔径光阑对它后面（像方）的

光学元件所成的像。由孔径光阑定义可知，入射光瞳决定入射光束的大小，出射光瞳决定出射光束的大小。两者可以是实像，可以是虚像，也可以是孔径光阑本身。孔径光阑、入射光瞳、出射光瞳三者有共轭关系。凡经过入射光瞳中心的光线（主光线），必经过孔径光阑的中心和出射光瞳的中心。在使用目视仪器时，观察者的眼睛应在出瞳的位置。

出射光瞳　exit pupils　见“入射光瞳”。

主光线　chief ray　见“入射光瞳”。

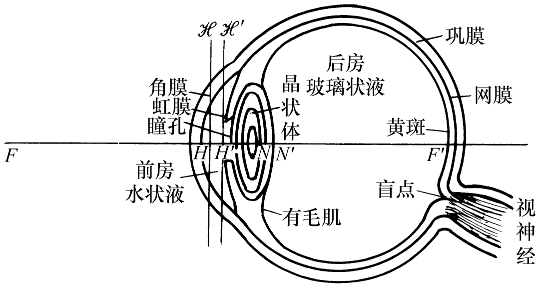
入射窗　entrance window　视场光阑对它前面（物方）的光学元件所成的像称入射窗，视场光阑对它后面（像方）光学元件所成的像称出射窗。视场光阑、入射窗、出射窗三者是共轭的。出射窗的边缘，对出射光瞳的中心所张的圆锥角，叫做像方角视场。入射窗的边缘，对入射光瞳的中心所张的圆锥角，叫做物方角视场。

出射窗　exit window　见“入射窗”。

渐晕效应　vignetting effect　在光学系统中，当远离光轴的物点成像时，由于光阑的存在，使能够到达像面上的光束逐渐变得窄小起来，结果使离轴的像点逐渐变暗，这个过程叫做渐晕效应。为了使像平面内视场边界清晰，可以把视场光阑放在物平面、物的中间实像位置或像平面上。

视角放大率　visual angular magnification　由于物体在视网膜上成像大小，正比于它对眼睛所张的角——视角，目视仪器的放大率，就是指这种视角的放大。视角放大率的定义为：$M=\frac{\theta'}{\theta}$，θ'为用仪器时像对眼所张的角，θ为不用仪器时物对眼所张的角。

人眼　human eye　人的眼睛是天然的光学仪器，整个眼睛为一个近似球形的胶状体，它包在一层坚韧的膜——巩膜之内，除了前面透明部分即角膜外，巩膜是白色不透明的，所以有眼白之称。角膜是眼睛的第一个透镜，折射率为1.376。角膜和晶体之间的部分称前房，其中充满 $n=1.336$ 的水状液。前房之后为虹膜，其中心为瞳孔，瞳孔直径可以调节，在强光下，可以收缩到1.5～2mm，在弱光下，可扩大到8mm左右，它起着孔径光阑的作用，控制进入眼睛的光能量和增强像的清晰度。虹膜中的色素，决定眼睛的色彩（蓝色、褐色、灰色、绿色或黑色），紧靠虹膜是晶状体（或称眼珠），其大小和形状都和一粒豆子差不多，内部是由复杂的分层纤维体（约有22000片）组成，外层的折射率为1.386，内层为1.406，并且它表面的曲率可因附近肌肉的松紧而改变。因此，它相当于一个焦距可变的透镜。晶体与视网膜之间（眼球内腔）称为后房，其中充满了折射率为1.336的玻璃状液。视网膜上有人眼的感光细胞，分杆状细胞和锥状细胞两种。杆状细胞是管暗视觉的，相当于高速、粗粒的黑白底片，非常灵敏。锥状细胞是管明视觉的，相当于低速、细粒的彩色胶卷，在亮光中，给出彩色细致的景像，在弱光中不灵敏。人的视觉的正常波长范围是390nm到780nm。人的眼睛最小分辨角，白昼照明时，在黄斑（视网膜中心的小凹陷，此处锥状细胞特别多和细）内为1′，趋向网膜边缘分辨本领急剧下降。眼睛视场，水平方向为160°，垂直方向为130°，其中只有中央6°～7°的一个小范围内才能看清物体的细节。

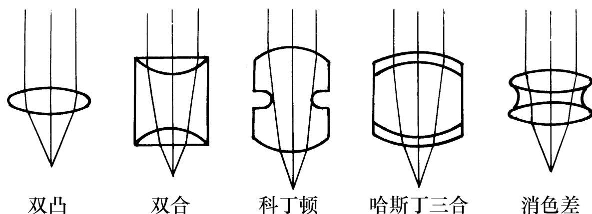


近点 near point 人眼的调节是靠晶状体周围的肌肉作用,肌肉用力时,晶状体的曲率增大,可看清近物,肌肉放松时可看清远物。当肌肉完全放松时,眼睛所能看清楚的最远点,称为远点。当肌肉最紧张时,眼睛所能看清楚的最近点,称为近点。正常眼的远点为无穷远,近点在明视距离(见“明视距离”)。远点不在无穷远的眼睛,称为近视眼。凡是近点大于明视距离的眼睛,称为远视眼(或老花眼)。远点与近点之间的距离称为调节范围,对每个人来说,近点、远点以及调节范围都是可变的。一般来说,随着年龄的增大,近点变远,从而使调节范围变小。

远点 far point 见“近点”。

明视距离 distance of distinct vision 在合适的照明条件下(50～100lx),一般眼睛最方便、最习惯的工作距离为 25cm,该距离称为明视距离。

放大镜 magnifiers 放大镜是一个焦距小于明视距离的正透镜。它的作用是放大物体在网膜上所成的像,而像的大小是与物体对眼睛所张的视角成比例的,所以放大镜的作用也就是放大视角。放大镜上标志的放大率(视角放大率)为:使用放大镜时物放在放大镜的焦距处眼对像所张的角与不用放大镜时眼对放在明视距离的物所张的角度之比。放大率的公式:$M=\frac{25}{f}$。单个透镜的放大率约为 2× 到 3×,复杂放大镜的放大率大约为 10× 到 20×。常见的种类见图。



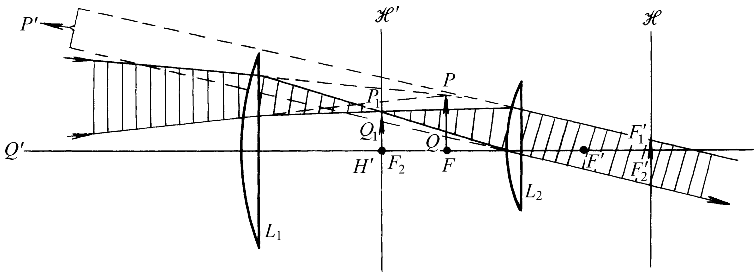
双凸　双合　科丁顿　哈斯丁三合　消色差

显微镜 microscopes 它比简单的放大镜有更大的放大率。它由物镜(靠近物体的透镜组)和目镜(靠近眼睛的透镜组)组成。物体通过物镜,在目镜的场阑位置上成一个放大倒立的实像,目镜再进一步放大此中间像。整个系统的放大率(视角放大率)是物镜的横向放大率 $M_{物}$ 和目镜的视角放大率 $M_{目}$ 的乘积:$M=M_{物}M_{目}$。物镜上标记 10×、50×、100×,即指在系统中物镜的横向放大率(在显微镜中)为 10 倍、50 倍、100 倍。目镜上标记 5×、10×,即目镜的视角放大率为 5 倍、10 倍。物镜上标记的第二个数为数值孔径 $N.A.$(见“数值孔径”)是聚光本领的量度。

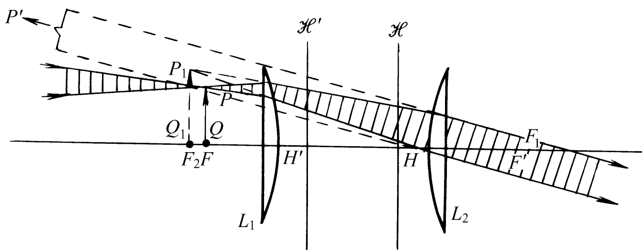
数值孔径 numerical aperture 它的定义为:$n_0\sin\theta_{max}$,在显微镜中,n_0 是物镜周围媒质(空气、油、水等)的折射率。θ_{max} 为物镜所能收纳的最大光线锥的半角,即边缘光线和光轴的夹角。数值孔径的范围是从低倍物镜的 0.07 到高倍物镜(100×)的 1.4 左右,显微镜的分辨本领和数值孔径有关。

目镜 eyepieces 它是一种目视光学仪器。从作用看,基本上是一放大镜,只是功能不同,它是用来观察由前面系统所成的物体的中间像。目镜放大率:$M=\frac{25}{f}$,f 为以 cm 为单位的目镜焦距。目镜的种类很多,除常用的惠更斯(Huygens)目镜和拉姆斯登(Ramsden)目镜外,还有许多具有不同特点的目镜,如消色差的凯耳纳(Kellner)目镜,具有宽视场、高放大率的无畸变目镜,对称目镜,可变放大率可变焦距的目镜和非球面目镜等都已出现在目镜的产品目录上。

惠更斯目镜 Huygens' eyepiece 由向场镜 L_1 和接目镜 L_2 组成,两者的焦距和间隔 d 之间的比例为f_1∶f_2∶d=3∶1∶2,整个目镜的物方焦点在两透镜之间,只能放大虚物,所以不能作普通放大镜用。价格便宜,但出射光瞳离接目镜太近有 3mm 左右,使用时不方便。



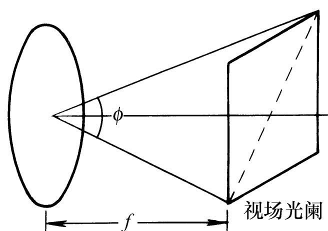
拉姆斯登目镜 Ramsden eyepiece 由向场镜 L_1 和接目镜 L_2 组成，两者的焦距和间隔 d 之比例为：$f_1 : f_2 : d = 1 : 1 : \frac{2}{3}$，此目镜系统的物方焦点是在向场镜的前面。使用时，中间像可出现在物方焦点处，测量用的分划板也放在物方焦点处，由于中间像和分划板在同一平面上，可对中间像进行精确测量和定位。整个目镜的出射光瞳离接目镜 12mm，比惠更斯目镜优越，价格便宜，也比较普及。



望远镜 telescope 结构和显微镜很相似，由物镜和目镜组成。由于望远镜所要观察的物体在很远的地方(可以看成无穷远)，因此，中间像成在物镜的像方焦面上，目镜在望远镜中起着放大镜作用。通常调整目镜的位置，使它的物方焦点和物镜的像方焦点重合，在这种情况下，从中间像上的一点发出的光线将会平行地离开目镜，使正常眼睛能够在松弛的情况下进行观察。望远镜的视角放大率为使用望远镜最终虚像对眼的张角 θ' 和不用望远镜物对眼的张角 θ 之比值。$M = \frac{\theta'}{\theta} = -\frac{f_o}{f_e} = -\frac{D}{d}$，其中 f_o、f_e 各为物镜、目镜的焦距，D、d 各为物镜孔径(望远镜物镜的边缘为望远镜的孔径光阑，即望远镜的入瞳)和出射光瞳的孔径。望远镜的最小分辨角为：$\theta = 1.22\ \frac{\lambda}{D}$，$D$ 为物镜的孔径。由于采用的元件不同，望远镜又可分为折射望远镜、反射望远镜、反射折射望远镜。折射望远镜中，如果对物体的取向有要求时，望远镜内必须有一个附加的正像系统，这种望远镜又叫做地上望远镜。反射望远镜，不像折射望远镜对镜头的材料有严格要求，支承问题容易解决，又没有色差，一般大型望远镜几乎全是反射望远镜。反射折射望远镜由于可校正球差，获得的视场比较宽，可用于特殊的光学仪器中，如卫星和导弹的跟踪仪器、流星照相机、小型的商用望远镜、望远照相物镜和自动式导弹系统等。

照相机 camera 照相机的主要部分是照相镜头、暗箱和放置感光板(胶卷)的支架。照相机的基本原理就是通过正透镜组(镜头)，将远处或近处的物在照相胶片或干板上生成清晰的实像。为了达到此目的，照相机中有调节装置，可在小范围内调节镜头与底片之间的距

离，使不同远近的物体都能成清晰的实像于胶片上。镜头中附有一个大小可变的光阑(可变的孔径光阑)，其作用有二：一是影响底片上的照度，从而影响曝光时间的选择；二是影响景深。胶片的周界就是照相机的视场光阑，视场光阑的对角线对透镜所张的角就是照相机的角视场(见图)。角视场与镜头的焦距有关，一



般照相机镜头的焦距在 50mm 左右，角视场从 40°到 50°。对于一定大小的底片，减少 f，会得到更大的角视场。广角镜头焦距范围从 40mm 到 6mm，角视场从 50°到 120°或更大范围。望远照相镜头焦距很长(80mm 或更大)，角视场最小只有几度。优良相机应有大的相对孔径、大的视场角和没有畸变、平的像面。因此照相镜头的设计，只有采取折衷的办法考虑校正像差。才能适应各种特殊需要。照相机镜头的种类也是多种多样：廉价相机的弯月形透镜、对称透镜组合的蔡司厂的奥索曼泰(Ziss Orthometar)镜头(广角镜)、库克(Cooke)三合镜头、忒萨(Tessar)镜头、望远照相镜头等。一般照相镜头上有焦距和 f 数的标志。

针孔照相机　pinhole camera　用小孔代替照相镜头的照相机。它独特的优点，是能够在很宽的角视场内、很大的景深的情况下，对物体成一个清晰的、无畸变的像。最大清晰度所对应的小孔，其大小正比于小孔到像的距离。其惟一缺点是曝光时间太长(约 $f/500$)。

相对孔径　relative aperture　透镜的孔径 D 和透镜的焦距 f 之比：D/f 叫做相对孔径，其倒数叫做 f 数或 $f/\#$，即 $f/\# = \frac{f}{D}$。在像平面上，单位时间单位面积上能量和相对孔径的平方成正比，所以相对孔径愈大，曝光时间可以愈短，曝光时间和相对孔径的平方成反比，也即和 f 数的平方成正比。照相机的曝光时间正比于 f 数的平方，所以，有时将 $f/\#$ 叫做镜头速度。通常照相镜头的光圈上标志着的 1，1.4，2，2.8，4，5.6，8，11，16，22 等数，就是相应位置的 f 数。

f 数　f value　见“相对孔径”。

景深　depth of field　在成像系统中，不但要求对某一平面能成清晰的像，而且往往要求物体前后的景物，都能成清晰的像。如照相机在拍摄风景照时，就有此要求。在像平面上，能同时清晰成像的最远与最近点之间的距离，称为景深。景深与物体的位置、透镜的相对孔径大小有关，距离越远，相对孔径越小，则景深越大。

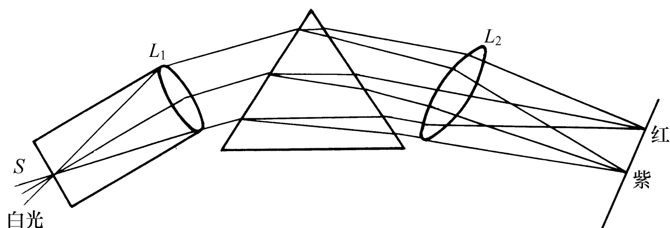
投影仪器　projection instrument　它的主要部分是一个会聚的投影镜头，将画片(被照明的平面物)成放大的实像于屏幕上，供许多人观看，这一类仪器便是投影仪器。常用的电影放映机、幻灯机、印像放大机以及绘图用的投影仪等，都是属于投影仪器。由于要得到放大的实像，所以画片一般总放在镜头物方焦面附近，其放大率与像距成正比。在投影仪器中，为了使光源的光经过画片再进入投影镜头，所以在投影仪器中需要附有聚光系统(照明系统)。为了使屏幕上得到尽可能强的均匀照明，通常有两类聚光系统：临界照明和柯勒照明。为了充分利用光能，聚光装置中常在光源后面装上球面镜，球面镜的球心与光源位置重合。

临界照明　critical illumination　一类适用于小投影物的聚光系统，聚光镜将光源的像成在投影物上或它的附近，这种照明称为临界照明。电影放映机、幻灯机、印像放大机，都采用临界照明。其优点是光能利用率高，但不易得到均匀照明。

柯勒照明 Kühler illumination　这是一类适用于大投影物的聚光系统。其中聚光镜将光源的像成在投影镜头的入瞳上，这种照明称为柯勒照明。电化教育中的书写投影仪，就是采用柯勒照明。其优点是容易得到均匀的照明。

棱镜光谱仪　prism spectrometer　棱镜光谱

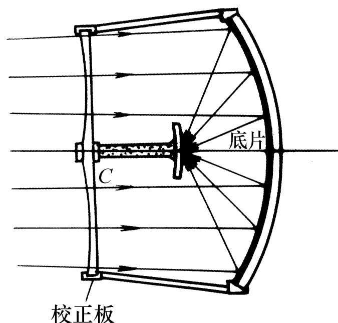
仪是利用棱镜的色散作用,将非单色光按波长分开的装置(见图)。其结构的主要部分为棱镜前的平行光管、棱镜和棱镜后的望远物镜 L_2。棱镜前的平行光管,是由一会聚透镜 L_1 和放在它第一焦面的狭缝 S 所组成。当非单色光照射狭缝后,经平行光管产生非单色的平行光束。这些非单色平行光束通过棱镜后,不同波长的平行光束经过折射后,方向不同。再经过棱镜后的望远物镜 L_2,不同方向(即不同波长)的平行光束,会聚到望远物镜后焦面上的不同地方,形成一系列离散的不同波长的狭缝像,这便是光谱。若光谱仪中的望远物镜后,再装上一目镜,用以直接观察光谱,此种光谱仪就称为分光镜。若在望远物镜的后焦面上,放一狭缝,将某种波长的光分离开来,则称为单色仪。若在望远物镜的后焦面上,放一暗盒,把不同波长的狭缝像拍摄下来,则称为棱镜摄谱仪。



分光镜 spectrometer 见“棱镜光谱仪”。

单色仪 monochromater 见“棱镜光谱仪”。

凯耳纳–施密特光学系统 Kellner-Schmidt optical system 它是一个凹(球)面镜和一个放在凹面镜曲率中心 C 处的非球面透镜所组成。其中非球面透镜使所有大孔径的平行光束,经其折射又经凹面镜反射后,可以在光轴同一焦点上会聚,消除了凹面镜的球差。它又能使与光轴成大角入射的平行光束,在进入系统后,比较好的会聚于另一点。这种系统的焦面,是一个曲率中心在 C 点的球面。这种系统用于照相机可得到极高的速率($f/0.5$)。正是由于具有非常高的速率,天文学中用它拍摄暗淡的星体或彗星的照片。如果焦面上涂以荧光材料,使紫外光在焦面上形成亮点,这样看紫外光如看可见光一样,所以这种装置也可用作快速、广角的紫外望远镜。



数码照相机 digital camera 数码照相机和传统照相机相同,也是由镜头、快门摄取景物的实像。但感光的媒质不是具有感光剂的胶片,而是电子式的感测器,这种感测器直接把实像的光能转为数码信号,再作进一步的处理和储存。所以数码照相机不用胶片而是用快速储存卡。由于景物的像已变成数字化信息,数码照相机可以直接与计算机连通并配合使用。通过计算机,可将数码照相机拍来的影像进行色彩、光度、轮廓的修补,甚至可以加入完全不同的效果。经数字化后的像不必冲印,就可通过打印机输出,还可用电子邮件即时发送到不同地方。像素数是数码照相机的主要性能指标,一般 200 万个像素以上的数码照相机的像质,才可以完全与传统照相机相比拟。

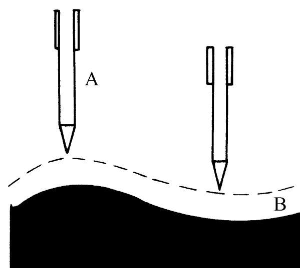
变折射率介质 graded media 变折射率介质,是指折射率按一定规律变化的介质,因此也是非均匀介质。根据折射率的变化规律,又分成梯度折射率介质和渐变折射率介质。自然界存在着多种变折射率介质,如地球周围的大气的折射率随离地面高度增加而递减,人的眼球的折射率也是从中心向外逐渐变化的。现代通信的主要载体——光纤是细而长的变

折射率介质,粗而短的变折射率介质可用作导光、成像,是微光学器件的重要材料。用轴向分布的变折射率材料制作的双球面器件,具有普通透镜成像功能,有确定的物像关系,并且在改正像差方面有更大的优越性。用径向分布的变折射率材料制作的棒透镜(端面为平面),不但可以成像,而且还有一些独特的性质,如焦点位置随棒长作周期性变化,成像特点也与棒长有关等。

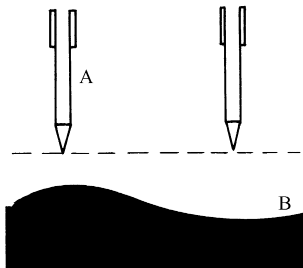
变焦距系统 zoom system 顾名思义,此种光学系统的焦距是连续可变的。由于系统的倍率是和系统的焦距有关,所以变焦距系统往往也是指倍率连续变化的可变倍率系统。人们在生产实践中,常常希望通过光学系统既能对物体作大区域小倍率的观察,又能对其中小区域进行大倍率的仔细观察,变焦距系统就是为适应此种要求而产生的光学系统。任一光学系统的焦距,是与组元和组元的间距有关。当组元的间距改变时,系统的焦距就会变,像的倍率和位置也会跟着变。变焦系统中,当焦距改变时,像的倍率跟着变,而像面是不变的或保持一定的位移量。设计时,为了消除像面的有害移动需要作抵消像面移动的补偿,从而产生不同的变焦系统:光学补偿和机械补偿。利用各组元位移之间的线性关系,达到变焦的同时,减少像面移动的系统叫做光学补偿系统。将各个运动组元,按不同的运动的规律作较复杂的移动,以达到完全防止像面移动的系统,为机械补偿系统。由于机械加工水平的保证,目前大多数的变焦系统是这种补偿系统。变焦距系统,目前已广泛应用于照相,电视,电影,显微镜,激光设备等领域。此种系统,主要指标是光焦度的最小数值,倍率变化的范围,系统长度等。

扫描隧道显微镜 scanning tunnel microscope

扫描隧道显微镜是一种新型的表面测试分析仪器,与传统的金相显微镜、扫描电子显微镜、透射扫描显微镜相比,具有结构简单,分辨率高等特点。工作条件宽容度大,对样品无破坏作用。横向分辨率达到 0.1nm,对样品垂直方向分辨率高达 0.01nm,有效地弥补以往显微镜的不足。现已成功地用于单质金属、半导体等材料表面原子结构的直接观察。其工作原理如图,A 为具有原子尺度的针尖,B 为分析样品。工作时样品和针尖间加一定电压。如样品和针尖间距离小于一定值时由于量子隧道效应,隧道电流对样品表面的微观起伏特别敏感。根据扫描过程中,针尖和样品间相对运动的不同,可分成恒电流模式如图(a)和恒高度模式如图(b)。前者根据针尖在样品表面扫描时的运动轨迹,直接反映样品表面的起伏程度,它适合于观察表面起伏较大的样品。后者控制针尖在样品表面某一水平面上扫描,通过记录隧道电流的变化,可得样品表面的形貌图,它适合于观察表面起伏较小的样品(小于 1nm),由于干扰小,从而获得更高分辨率的图像。光子扫描隧道显微镜原理与扫描隧道显微镜相同,当光纤尖进入样品全反射界面倏逝波光场中时,光纤尖将使倏逝场受抑,而发生光子隧道效应,使倏逝波光子在光纤尖内传输通过。光纤扫描时,以记录到的光子隧道信息推算样品表面起伏信息,从而获得样品表面的信息。



(a)



(b)

光子扫描隧道显微镜 photon scanning tunnel microscope 见"光子扫描隧道显微镜"。

微光学 micro-optics 微光学是一门新的学科，它是研究微米级、纳米级大小的光学元件的设计、制作工艺以及利用这类器件实现光波的发射、传播、变换及接收的理论和技术。其发展有两个主要分支：(1)基于折射原理的梯度折射率光学；(2)基于衍射原理的二元光学。两者在器件性能、工艺制作等方面各具不同特色。

衍射光学元件 diffraction optical element 它和传统的折射、反射光学元件不同。它是利用衍射原理有效地控制光波的波前，以实现各种不同的功能。衍射光学元件的设计是通过计算机设计元件表面的掩模图形，从而灵活地控制波前。它能集多种光学功能于一体，且具有能复制的特点，使光学系统得以向轻型化、微型化和集体化发展。这种光学元件已广泛应用于激光波面校正、光束剖面成形、光束阵列发生器。光互连、光计算、微型光通信和激光加工等方面。

微透镜 micro lens 通常指直径从几毫米到十微米的微小透镜。其制作方法有传统的研磨方法、选择性离子交换法、光热法、离子刻蚀法和热压成型等方法。

微透镜阵列 micro lenses array 它是把几十个或几百个微透镜排列而组成的阵列。常用于光纤通信、光耦合、空间分割多重化和自适应光学中控制器件。

二、光 度 学
Photometry

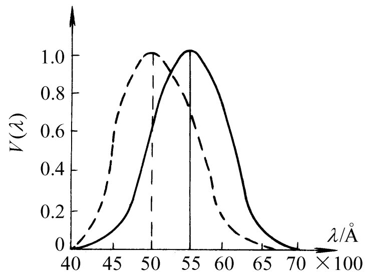
辐射度学 radiometry 辐射度学是对各种电磁辐射进行计量的一门学科。

光度学 photometry 光度学是仅对可见光(电磁辐射中很窄的波段)进行计量的一门学科，与几何光学有密切的关系。

辐射通量 radiant flux 在单位时间内，由辐射体表面的一定面积上发出的，或通过一定接收截面的辐射能，称为辐射通量，其单位为 W(瓦)或 kW(千瓦)。

辐射通量的谱密度 spectral density of radiant flux 它表示在某一波长 λ 附近的单位波长间隔内所具有的辐射通量，以 e_λ 表示，它是描述辐射能在频谱中的分布。

视见函数 vision function 视见函数 $V(\lambda)$，是反映人眼对可见光区域中各种波长光的相对视觉灵敏度。它与外界条件有关。在白天，人眼的视觉对波长 550nm 左右的绿光最敏感。在昏暗的环境中(夜晚)，视见函数向短波(蓝色)方向移动，所以它又分为：适光性视见函数(图中实线)和适暗性(微光)视见函数(图中虚线)，这也说明为什么在有月光的夜晚观察，总感觉到周围环境是蓝绿色的。



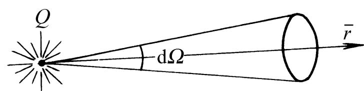
光通量 luminous flux 光通量 Φ 是描述客观的辐射通量引起的视觉强度，它等于辐射通量与视见函数的乘积。光通量的单位是 lm(lumen，流明)。

最大的光功当量 the maximal mechanical equivalent of light 对人眼最灵敏的 550nm 绿光，单位辐射通量引起的光通量 $k_m = 683$ lm/W。

发光强度 luminous intensity 点光源 Q 沿某一方向 r 的发光强度 I 的定义为：沿此方向单位立体角内发出的光通量 $I=\dfrac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\Omega}$，它的单位为 cd(candela，坎[德拉]，1 坎[德拉]＝1 流[明]/1 球面度)。

$$I=\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\Omega}$$

亮度 luminance 扩展光源中，面源 ds 沿 r 方向的亮度，定义为此方向上，单位面积的发



光强度

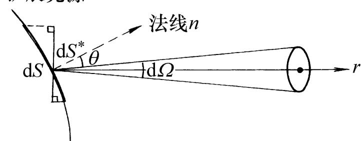
$$L=\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}s'}=\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}s\cos\theta}=\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}s\cos\theta}$$

$\mathrm{d}s'$为投影面积，$\mathrm{d}\Phi$为面元在$\mathrm{d}\Omega$中发出的光通量。它是为了描述面光源在不同方向上的辐射特性而引入的物理量，单位为 $\mathrm{cd/m^2}$（坎[德拉]每平方米）。

常见光源的亮度见下表。

在地球大气层外看到的太阳	约 190000 $\mathrm{cd/m^2}$
通过大气看到的太阳	约 150000 $\mathrm{cd/m^2}$
钨丝白炽灯	约 500 $\mathrm{cd/m^2}$
蜡烛火焰	约 0.5 $\mathrm{cd/m^2}$
通过大气看到的满月	约 0.25 $\mathrm{cd/m^2}$
晴朗的白昼天空	约 0.15 $\mathrm{cd/m^2}$
没有月亮的夜空	约 10^{-8} $\mathrm{cd/m^2}$

扩展光源

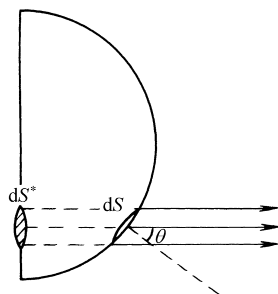


余弦发射体　cosine emitter　一扩展光源的发光强度与$\cos\theta$成正比，从而其亮度L与方向无关，这类发射体称为余弦发射体或朗伯发射体。按$\cos\theta$规律发射光通量，这种规律叫做朗伯定律。太阳是一个近似的“余弦发射体”。

朗伯发射体　Lambert emitter　见“余弦发射体”。

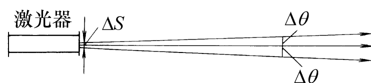
朗伯定律　Lambert law　见“余弦发射体”。

朗伯反射体　Lambert reflection body　一个理想漫射面，不管入射光来自何方，沿各方向



漫射光的发光强度总与$\cos\theta$成正比，从而亮度相同。积雪、刷粉的白墙以及十分粗糙的白纸面，都接近这类理想的漫射面，这类物体称为朗伯漫射体。

定向发射体　directing emitter　实际中有一类发射体，它们发出的光束集中在一定的立体角$\mathrm{d}\Omega$内，即亮度有一定的方向性。如成像光学仪器和激光器都有这种特征，特别是激光器，发出的光束截面很小且高度平行，可使不大的辐射功率获得巨大的亮度。



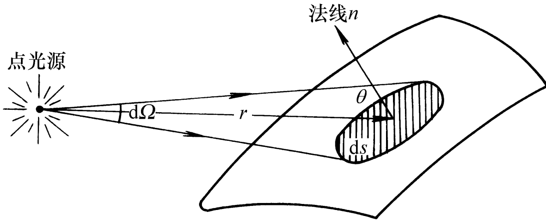
照度　intensity of illumination　一个被光线照射的表面上的照度，为照射在单位面积上的光通量。如面积$\mathrm{d}s$上的光通量为$\mathrm{d}\Phi$，则此面上的照度为$E=\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s}$，照度的单位为 lx（lux 勒克斯，1 勒[克斯]＝1 流[明]/1 平方米）。一些实际情况下的照度见下表。

无月夜天光在地面上的照度	3×10^{-4} lx
接近天顶的满月在地面上的照度	0.2 lx
办公室工作所必须的照度	20～100 lx
晴朗夏日在采光良好的室内照度	100～500 lx
夏天太阳不直接照到的露天地面上的照度	10^3～10^4 lx

点光源产生的照度 intensity of illumination by point source 发光强度为 I 的点光源，对被照射面元 $\mathrm{d}s$ 所张的立体角为 $\mathrm{d}\Omega$，其产生的照度为

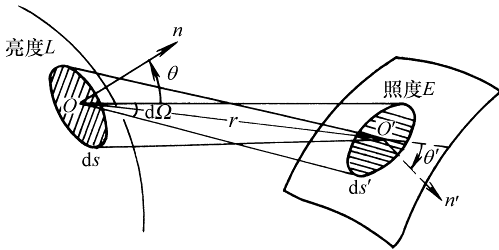
$$E=\frac{\mathrm{d}\Phi}{\mathrm{d}s}=\frac{I\cos\theta}{r^2}$$

这就是熟知的平方反比定律。



面光源产生的照度 intensity of illumination by surface source 亮度为 L 的面光源，在照射面元 $\mathrm{d}s'$ 上产生的照度

$$E=\iint_{\text{光源的表面}}\frac{L\mathrm{d}s\cos\theta\cos\theta'}{r^2}。$$



主观亮度 subjective luminance 对于扩展光源，眼睛的主观亮度就是视网膜上像的照度。用肉眼直接观察物体获得的主观亮度称为天然主观亮度。用助视仪器观察物体时，仪器的出瞳直径和视角放大率成反比，当出瞳的直径和人眼的直径相同时的视觉放大率为正常放大率。当助视仪器的放大率小于正常放大率时，主观亮度与天然主观亮度相等。当助视仪器的放大率大于正常放大率时，主观亮度将小于天然主观亮度。对于点光源，由于点光源的光通量只刺激网膜上个别的感光单元，它的主观亮度不取决于像的照度，而取决于进入眼睛瞳孔的总光通量。当用望远镜观察点光源时，如果它的入瞳较大，它就把较多的光通量射入观察者的瞳孔，所以望远镜可以使点光源的主观亮度大大增加。利用望远镜观察星体，可以使星体的主观亮度增大，但不改变作为扩展光源的天空背景的主观亮度，这样，使星体与天空背景主观亮度的对比度加大，使在白天也能看到星体。

三、色度学
Colorimetry

光与色 light and color 光是色的存在条件，如在黑夜里关上电灯，就看不见任何颜色，这表明色必须有光的存在。色是人眼对不同光谱成分的主观反映。人眼的色感觉虽然在一定程度上反映光谱的某些特点，然而并不能从看到的颜色来判断光谱的分布。一定的光谱分布，表现为一定的颜色。但同一种颜色，可以由不同的光谱分布来组成，此称为同色异谱。如黄色可以由单一波长的黄光所产生，也可以由波长不同的红光和绿光混合而产生，它

们给人眼的色觉却相同。

同色异谱 homochromy with different spectrum 见“光与色”。

非彩色和彩色 white black series and color 非彩色和彩色是颜色的两大类，总称为颜色。非彩色指白色、黑色和各种深浅不同的灰色，它们可以排列成一系列，由白色渐渐到浅灰，再到中灰、深灰，直到黑色，又叫白黑系列。它只有亮度差别，没有色调和饱和度的变化。彩色是指白黑系列以外的各种颜色，它有三种特性：亮度、色调和饱和度。

颜色的三要素 three elements of color 亮度、色调、饱和度为颜色的三属性，又称颜色的三要素。亮度是人眼所感觉到的颜色明亮程度的物理量。人眼对颜色的亮度感觉与颜色的光谱分布有关。对于各种不同颜色的光，尽管它们以相同强度照到人眼上，然而人眼对其的亮度感觉却不相同。人眼对于波长为555nm的黄绿色最敏感，其他波长的亮度感觉相对降低（其分布曲线可参看视见度曲线）。色调是表示颜色的种类，它取决于该颜色的主波长，有红色、绿色、黄色等等的区别。在自然界中，人眼所能分辨的物体颜色，大约有120～170种。饱和度是表示颜色浓淡程度的物理量，它是按该颜色混入白色光的比例来表示的。没有混入白光的光谱色其饱和度为100%，如果混入白色光的光谱色，其饱和度就降低，感觉的颜色就变淡，愈不鲜艳，当饱和度为零时就为白色光。

亮度 brightness 见“颜色的三要素”。

色调 hue 见“颜色的三要素”。

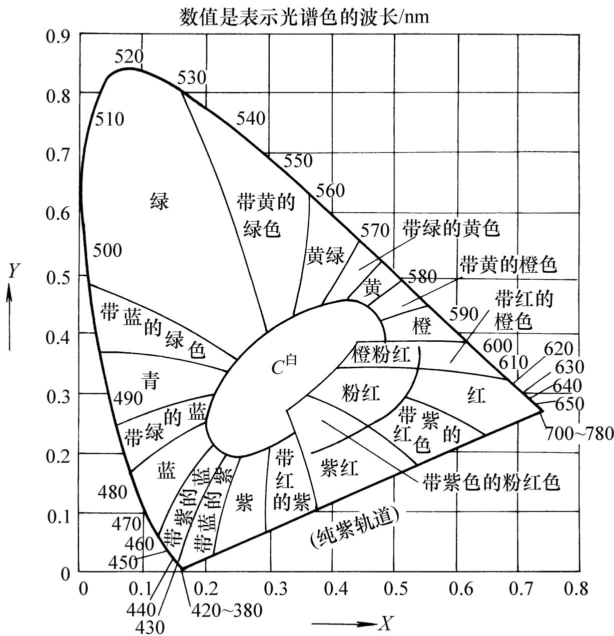
饱和度 saturation 见“颜色的三要素”。

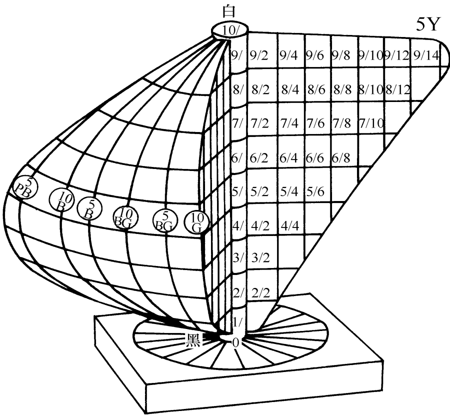
麦克斯韦颜色三角形 Maxwell color triangle 它是由麦克斯韦（J.C.Maxwell）提出的表示颜色的色度图。该色度图是一个直角三角形的平面坐标图。三角形的三个角顶，分别代表R、G、B三原色（一单位红原色、一单位绿原色、一单位蓝原色）。色度坐标 r 和 g 分别为R和G在R+G+B总量中的相对比例。在三角形色度图中，没有 b 的坐标，因为 $r+g+b=1$，$b=1-r-g$，给出 r 和 g 两个坐标，b 就确定了。在这种色度图中，标准白光的色度坐标为：$r=0.33$，$g=0.33$。现在常用的色度图就是从这种颜色三角形转化过来的。

色度图 chromatically diagram 色度图就是表示色度的图形。所谓色度，是把色调和饱和度两者合在一起的总称。任何一种颜色，可由它在色度图上的位置来决定，但因其不能代表亮度，不同亮度的颜色，在色度图上都占有同一位置。通常使用的标准色度图称为 X、Y 色度图，或叫做CIE（国际照明委员会）色度图，如图所示。其中马蹄形的曲线，代表了波长从380nm蓝紫色到780nm红色的各种颜色范围内的纯谱色的轨迹。在曲线的两端，颜色几乎没有变化，如380～420nm及700～780nm之间几乎挤成一点，这些纯谱色无颜色变化。在马蹄形的底部（400～700nm）的两点连结成的直线部分是没有波长标志的，因为它是由红和紫按各种不同比例混合而成的一系列的混合色，不是纯谱色。图中 C 点是国际照明委员会规定作为白色领域内的标准白色点。曲线内任何一点（P）均不代表纯谱色，而是代表一种混合色。C 和该点（P）连线（延长线）与马蹄形曲线的交点处的光谱色波长，即为该点（P）的主波长，也就决定了该点（P）的色调。该点（P）离标准白 C 点愈近，颜色的饱和度愈低，愈靠近马蹄形曲线，其色饱和度愈高。通常把 C 点的饱和度作为0%，而把马蹄形曲线上所有点的饱和度定为100%。在这两者之间的饱和度用色度图上该点到 C 点和 C 点到边缘点（该点的主波长）的距离的百分比来表示。在色度图中，任何经过标准白色 C 点的直线两端的颜色互为补色，因为如以适当比例混合，可得到白光。

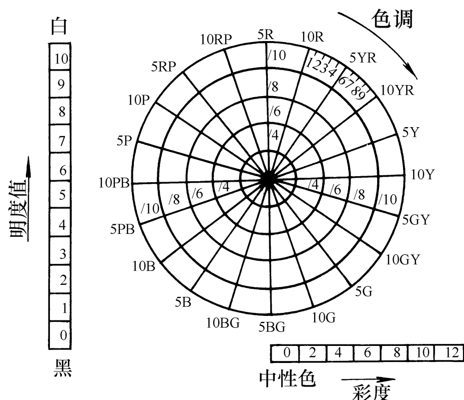
色度 chrominance 见“色度图”。

芒塞尔色系 Munsell color system 它是用立体模型来表示颜色的一种方法。它用一个三维空间的类似球体模型，把各种颜色的三要素：色调、亮度、饱和度全部表示出来，如图。芒塞尔颜色立体的中央轴，代表无彩色、白黑系列中性色的亮度等级。白色在顶部，黑色在底部，理想白定为10，理想黑定为0。颜色样品离中央轴的水平距离，代表饱和度的变化。





颜色立方体水平剖面上，各方向代表10种芒塞尔色调，包含5种主要色调：红(R)、黄(Y)、绿(G)、蓝(B)、紫(P)和5种中间色调：黄红(YR)、绿黄(GY)、蓝绿(BG)、紫蓝(PB)、红紫(RP)。在芒塞尔立体模型中，每一部位各代表一特定颜色，并给予一定的标号。目前国际上已广泛采用芒塞尔颜色系统，作为分类和标定颜色的方法。通过颜色立体模型的颜色分类，用纸片制成许多标准颜色样品，汇编成芒塞尔颜色图谱。



芒塞尔色系立体水平剖面

芒塞尔颜色图谱 Munsell color spectrum atlas 见"芒塞尔色系"。

颜色匹配 color match 将两个颜色调节到视觉上相同或相等的方法,叫做颜色的匹配。进行颜色匹配实验时,须通过颜色相加混合的方法,改变一个颜色或两个颜色的亮度、色调、饱和度使两者匹配。

颜色的混合 color mixture 颜色的混合可以分成两种。一种是将两束光分别通过两种滤色片后,投到屏幕上进行的混合为相加混合。如果两滤色片一是蓝色,一是黄色,经过相加混合后为白色。另一种混合是将一束光先后通过两个滤色片后,出来的混合光为相减混合。如两滤色片仍是一蓝一黄,相减混合后出来的是绿光。用两种相同的滤色片,通过两种不同的混合后,结果完全不同。主要是两种混合是属于两种不同的过程,服从的规律也不同。人眼对颜色的主观感觉、彩色电视的颜色,都具有相加混合的特性。而染料、涂料、彩色印刷、彩色摄影,都是利用颜色的减法混合的特性来控制颜色。

格拉斯曼颜色混合定律 Grsassmann color law 由格拉斯曼(Grsassmann)总结的在颜色相加混合时的规律,其中包括(1)人的视觉只能分辨颜色的三种变化:亮度、色调、饱和度;(2)两种颜色混合时的补色律和中间色定律;(3)感觉上相似的颜色,可以互相代替——代替律;(4)亮度相加定律:由几个颜色组成的混合色的亮度,是各颜色光亮度的总和。

加法三原色 addition tricolor 加法混合时采用的三原色,也就是统称的三原色或三基色:红(Red)、绿(Green)、蓝(Blue),各以 RGB 表示。加法混合时,有如下的结果:

红色＋绿色＝黄色
红色＋蓝色＝紫色
蓝色＋绿色＝青色
红色＋绿色＋蓝色＝白色

其中青、紫、黄分别是红、绿、蓝相应的补色。一般说来,如果两种彩色光以适当的比例加在一起能得到白光,那么,这两种颜色互为补色。例如,黄色和蓝色互为补色。

互补色 complementary color 见"加法三原色"。

减法三原色 subtractive tricolor 减法混合时采用的三原色:黄(Yellow)、紫(Magenta)、青(Cyan)。它们分别是蓝、绿、红的补色,即白光中分别减去蓝、绿、红后的颜色,以减蓝、减绿、减红三色以控制蓝绿红。减法混合主要是考虑吸收后的光,其结果如下:

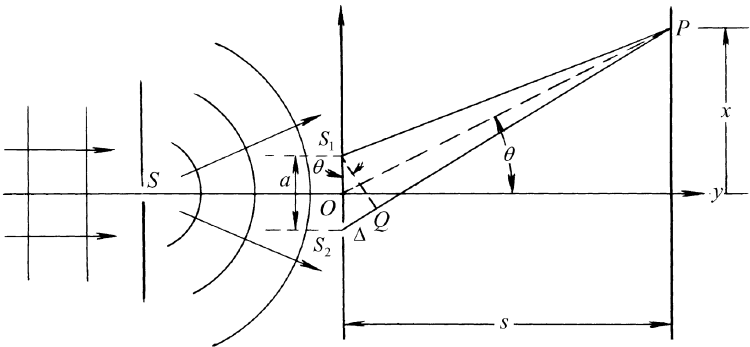
黄色＝白色－蓝色
紫色＝白色－绿色
青色＝白色－红色
黄色＋紫色＝白色－蓝色－绿色＝红色
黄色＋青色＝白色－蓝色－红色＝绿色
紫色＋青色＝白色－绿色－红色＝蓝色
黄色＋紫色＋青色
＝白色－蓝色－绿色－红色＝黑色

这些关系式表明颜料依次相加(相减混合)后的结果。这种三原色必须和加法混合中的三原色加以区别,不可混为一谈。

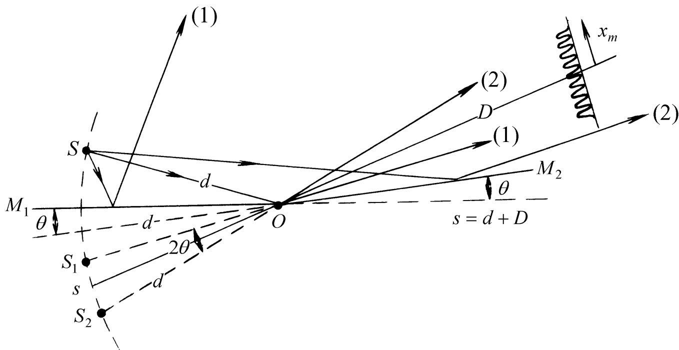
四、干　涉
Interference

杨氏实验 Young experiment　杨氏实验是许多分波前干涉实验的原型，无论从经典光学还是从现代光学的角度看，杨氏实验都具有十分重要的意义。其实验装置如图所示，单色光照射在屏 S 的小孔上构成单色点光源。按惠更斯原理，S_1 和 S_2 将作为两个次级波源向前发射球面波，在较远的屏上，可观测到一组几乎平行的直线条纹。屏幕上的强度分布为：$I=4I_0\cos^2\frac{\delta}{2}$，式中 δ 为 S_1 和 S_2 发出的光波在观察点 P 的相位差，即 $\delta=\frac{2\pi a}{\lambda s}x$，$s$ 为双孔所在的屏至观察屏的距离，a 为双孔间距。

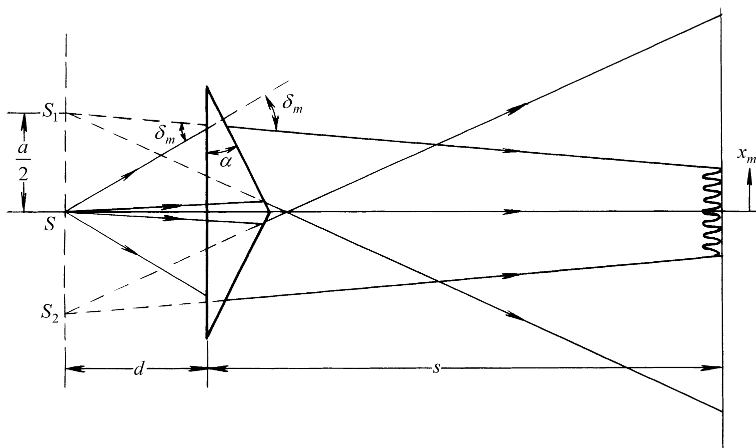
由于在观察屏上不同的点有不同的相位差，因而屏上各点的光强不同。当相位差为 $\delta=2m\pi(m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ 时光强最大，为亮条纹。当 $\delta=(2m+1)\pi(m=0,\pm1,\pm2,\cdots)$ 处，光强为极小值。条纹间距为 $\Delta x=\frac{\lambda s}{a}$，如屏的方位任意放置，则干涉条纹为屏与旋转双曲面的交线。为提高干涉条纹的亮度，实际上 S，S_1 和 S_2 是采用三个互相平行的狭缝，由于 S_1 和 S_2 是二互相平行的狭缝，所以又称杨氏双缝干涉。



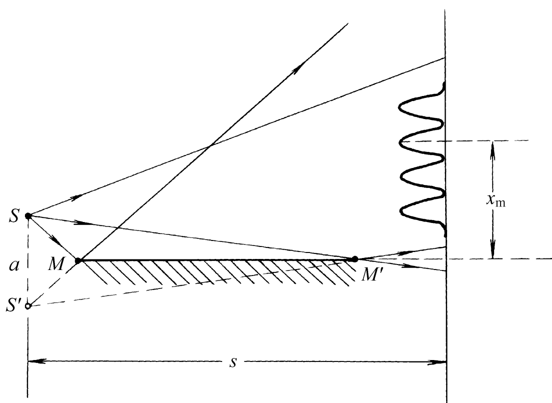
菲涅耳双面镜实验 Fresnel double mirror experiment　法国物理学家菲涅耳在 1818 年采用缝光源发出的柱面波，经夹角很小的双面镜反射后获得相当于由一对相干光源发出的二束光，在光的重叠区内可观察到明暗相间的干涉条纹。两个虚光源的间距为 $a=d(2\theta)$，屏离 O 点的间距为 D，$s=d+D$，则干涉条纹为 $x_m=m\frac{\lambda s}{2d\theta}$。



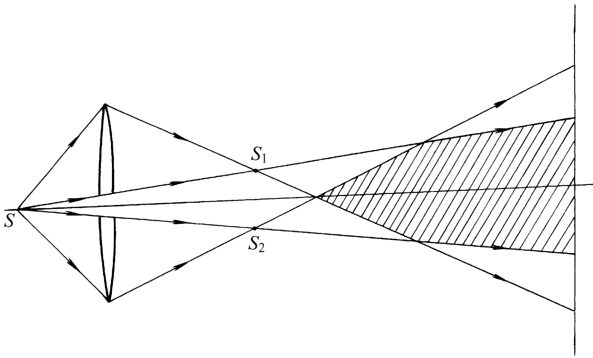
菲涅耳双棱镜实验 Fresnel double prism experiment 法国物理学家菲涅耳在1814年采用缝光源发出的柱面波,经夹角很小的双棱镜折射后,获得一对相干的缝光源,在观察平面上可观察到明暗相间的干涉条纹。两个虚光源 S_1 和 S_2 的间距为 $a=2d\alpha(n-1)$,α 为双棱镜的夹角,屏离虚光源间距为 $d+s$,则干涉条纹为 $x_m=\frac{m\lambda(d+s)}{2d\alpha(n-1)}$。



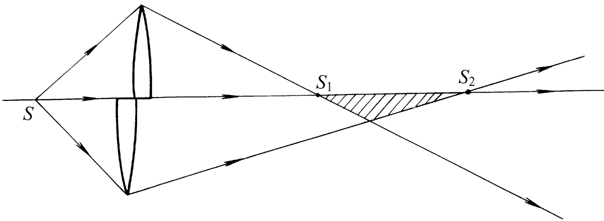
洛埃镜实验 Lioyd mirror experiment 洛埃采用如图所示的装置,从缝光源 S 发出的光,下半部的光经平面镜反射与缝光源的光在交叠区域内产生干涉现象,其干涉条纹为 $x_m=\frac{m\lambda s}{a}$。式中 a 为光源 S 到镜面距离的两倍,s 为光源到屏的间距。从洛埃实验证实了光由光疏介质向光密介质入射时,反射光的相位有 π 的变化,也称半波损失。



比累剖开透镜 Billet split lens 它是由一凸透镜沿直径剖开,沿垂直于光轴拉开一定距离构成,从单个光源 S 发出的光,经两个半透镜形成了两个实像 S_1 和 S_2。在叠加的区域产生了明暗相间的干涉条纹。



梅斯林实验　G. Meslin experiment　它将比累剖开透镜的两半沿光轴拉开一个距离，形成的两个实像 S_1 和 S_2 位于光轴上，相应的光在两点之间的一个交叠区域。在垂直于 S_1S_2 的平面上，可观察到同心的半圆形的干涉条纹。



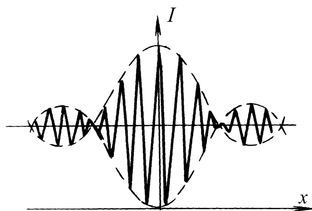
非定域干涉　interference of non-localization　用波前分割法产生相干光源，采用的光源宽度应小于临界宽度，在光的交叠区域内无论观察屏放在何处均可得到清晰的条纹，这种干涉称为非定域干涉。

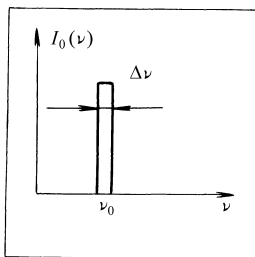
准单色光　quasi-monochromatic light　准单色光是实际存在的光场，准单色光的条件是：(1)窄带光，即 $\Delta\nu/\nu_0 \ll 1$，式中 $\Delta\nu$ 为窄带光的带宽，ν_0 为中心频率；(2)小程差，即产生干涉的光程差小于相干长度。当窄带光($\Delta\nu \ll \nu_0$)又满足在干涉系统内的最大光程差远小于光源的相干长度时，称作准单色光。

准单色光的干涉条纹　fringes with quasi-monochromatic light　讨论杨氏实验的干涉条纹，设光源的光谱分布为矩形，且 $\Delta\nu \ll \nu_0$，在宽度为 $\mathrm{d}\nu$ 内光强度为 $I(\nu)\mathrm{d}\nu$，产生的总干涉强度为

$$I(x) = 2I_0\Delta\nu \times \left[1 + \frac{\sin\left(2\pi\Delta\nu\dfrac{ax}{sc}\right)}{2\pi\Delta\nu\dfrac{ax}{sc}}\cos\left(2\pi\nu_0\dfrac{ax}{sc}\right)\right]$$

s 为双孔屏至观察屏间距离，a 为双缝间距，c 为光速。因此可见度函数为 $V(x) = \dfrac{\sin\left(2\pi\Delta\nu\dfrac{ax}{sc}\right)}{2\pi\Delta\nu\dfrac{ax}{sc}}$，随 $\Delta\nu$ 增宽可见度变坏，在 $\Delta\nu = \dfrac{nsc}{2ax}$，$n=1,2,\cdots$ 处，$V(x)=0$。当变更观察点位置时，可见度在中央最好，随远离屏而逐渐下降。在一般情况下，可见度函数是由光源的光谱分布所决定，通过对条纹的可见度的测量来求出光源的光谱，这就是自 20 世纪 60 年代发展的傅里叶变换光谱学。





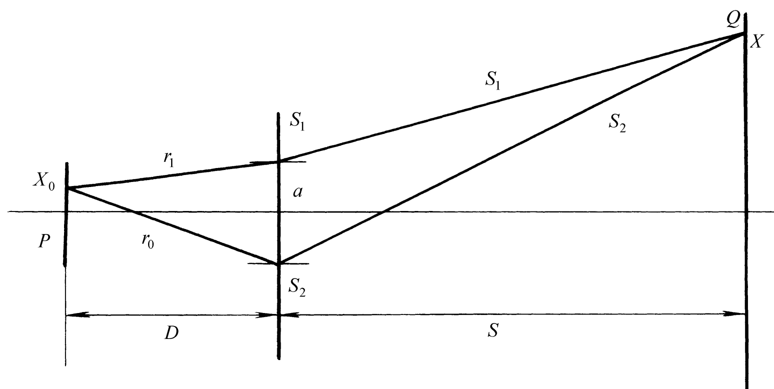
扩展光源的干涉 interference of light with extended source 实际光源总是有一定的大小。现考察杨氏实验,采用一线度为 P 的均匀单色光源照明,在光源点 x_0 处的线元 $\mathrm{d}x_0$ 发出的光波通过杨氏装置后,在 Q 点形成的干涉场为

$$\mathrm{d}I(x)=2I_0\times\left\{1+\cos\left[k\left(\frac{a}{s}x+\frac{a}{D}x_0\right)\right]\right\}\mathrm{d}x_0,$$

则在 Q 点总的光强为

$$I(x)=2I_0p\times\left[1+\frac{\sin\left(\frac{\pi ap}{\lambda D}\right)}{\frac{\pi pa}{\lambda D}}\cos\left(\frac{2\pi a}{\lambda s}x\right)\right],$$

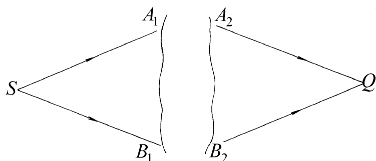
条纹的可见度是 $\nu=\dfrac{\sin\left(\frac{\pi}{\lambda}\frac{pa}{D}\right)}{\frac{\pi pa}{\lambda D}}$,与观察点位置无关,只随光源的扩展,条纹的对比度下降。当光源的宽度 $p<\lambda D/4a$ 时,可见度大于0.9,有很好的对比度。如调整双孔的间距 a,使条纹第一次消失,其间距为 $a_0=\dfrac{\lambda}{\frac{p}{D}}=\dfrac{\lambda}{\alpha}$, $\alpha=\dfrac{\lambda}{a_0}$,式中 α 是光源线度对双孔平面所张的角度。



干涉条纹的定域 localization of fringes 设双光束干涉仪用准单色点光源 S 照明,其波长为 λ_0。Q 为观察区内一点,则从 S 到 Q 的两束光的相位差为 $\delta_0=\dfrac{2\pi}{\lambda_0}\times\{[SA_2B_2Q]-[SA_1B_1Q]\}$,$\delta_0$ 的值只与 Q 点的位置有关,即每个 Q 点都只对一个 δ_0 值,在来自 S 的两

光束的公共区域内任何平面上都有干涉条纹形成。它们是 δ_0 为常数各点的轨迹。条纹的对比度仅仅取决于两个波的相对强度，我们称这种条纹为非定域条纹。

当光源是以 S 为中心的准单色扩展光源时，这种光源是由大量的互不相干的点光源构成。每个点光源产生一个非定域的干涉图样，因此在每个观察点的总强度为这些元干涉图样的强度和。如扩展的光源所有各点在 Q 点产生的相位差不同，则 Q 点附近各元图样相互错位，造成在 Q 点干涉条纹的可见度比采用点光源时低。当光源逐渐扩展时，相互位移增大，可见度下降，但位移增加量依赖于观察 Q 点的位置。在某些 Q 点可见度可保持或接近点光源时的值，在其他地方实际已下降到零。这时我们说这些条纹是定域的。当各元图样的相互位移比一个序小得多时，它对条纹的影响很小，只要 $\delta_{max}-\delta_{min}\leqslant\frac{\pi}{2}$，条纹的可见度的损失不大，式中 $\delta_{max}-\delta_{min}$ 为扩展光源各点在 Q 点产生的最大和最小相位差。相反，$\delta_{max}-\delta_{min}\gg\pi$ 时条纹的可见度将非常小。例如，对两平行平面形成的等倾干涉条纹装置，当使用面光源时，条纹的定域在无穷远处，如用透镜观察，则条纹定域在透镜的后焦平面上。对劈形薄膜，干涉条纹定域在膜的表面附近。干涉条纹定域的位置由条纹可见度的极大值决定。即 $d\delta=0$。



定域条纹 localized fringes 见“干涉条纹的定域问题”。

非定域条纹 non-localized fringes 见“干涉条纹的定域问题”。

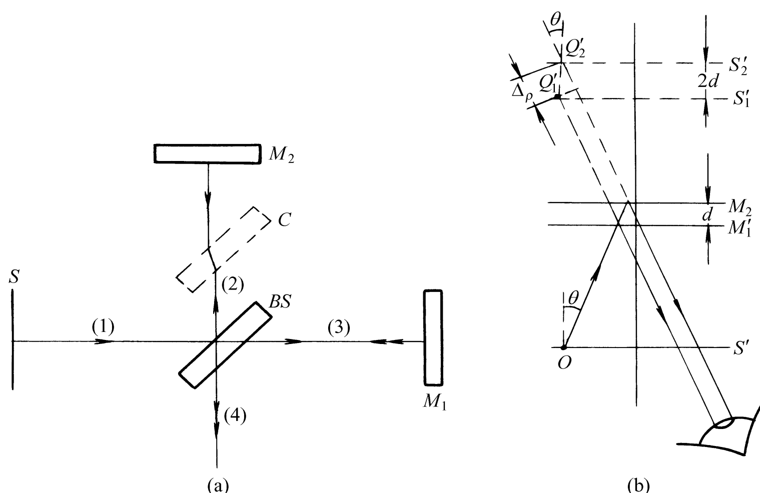
多色光的干涉 interference of polychromatic light 多色光可用分布在某一频率范围内的互不相干的许多单色成分的组合来表示，则平均光强为

$$I=\frac{N}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}|u(\nu)|^2 d\nu$$

式中 $u(\nu)$ 为单色波的振幅。故多色光干涉的平均强度与组成单个波列强度的积分成正比，即每一个单色成分各形成一个干涉图样，这些干涉图样按强度叠加就形成多色光干涉图样，亦即非相干强度叠加。

消色差干涉条纹 achromatic fringes 采用白光照明得到的条纹：零级为一白色的中心条纹，两边各有几个彩色的条纹，但随级数的增加，不同波长的干涉条纹错位也增大，形成均匀的白色照明，这就是白光干涉条纹。利用它可探知条纹的级数。在光学系统中加入某种色散元件，使到达干涉平面上光的色散得到补偿，使不同波长的干涉条纹形成在同一位置，可得到高对比度的黑白干涉条纹，即消色差干涉条纹。利思（Leith）提出一种双光栅消色差干涉系统，已用来研究白光全息图的记录。

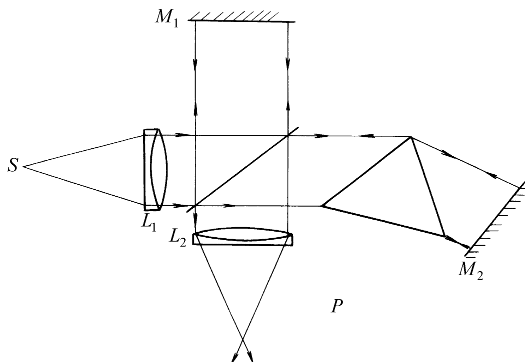
迈克尔逊干涉仪 Michelson interferometer 迈克尔逊干涉仪是由美国物理学家 Albert Michelson 于 1881 年研制成的。它对近代物理发展起着重要的作用，其结构如图所示，入射光通过分束镜 BS 后被分解为反射光束（2）和透射光束（3），它们的振幅近似相等。在 M_2 和 BS 间放置一补偿板 C，使光束（3）经 BS 的光程和光束（2）经 C 的光程相等，BS 上的半反射膜使 M_1 在 M_2 附近产生平行于 M_2 的虚像 M'_1，光在迈克尔逊干涉仪中自 M_2 和 M_1 的反射相当于从 M_2 和 M'_1 的反射，所产生的干涉与厚度为原空气平行板所产生的干涉一样，其光程差为 $\Delta=2d\cos\theta$，如果 M_2 和 M'_1 完全平行时，得到等倾干涉，其条纹位于无限远或透镜的焦平面上。亮条纹的条件为 $2d\cos\theta=k\lambda$，$k=0,1,2\cdots$ 如采用扩展准单色光源，其等倾干涉条纹为一同心圆环，随 θ 的增加，条纹的间距愈小。当 M_1 和 M_2 不完全垂直时，由 M_2 和 M'_1 构成一楔形空气劈，得到等厚干涉，其干涉条纹为一组明暗相间的直条纹。如采用白光，在零级附近可观察到几级彩色的干涉条纹。



(a)　　(b)

迈克尔逊干涉仪的应用　applications of Michelson interferometer　迈克尔逊与莫雷(Morley)在1887年利用这一装置作的著名的迈克尔逊-莫雷实验否定了“以太”的存在，为爱因斯坦建立狭义相对论的实验基础之一。除此以外，在干涉计量中也有着广泛的应用，如测定微小的长度、气体的折射率和光谱的精细结构。后人又将干涉仪的基本原理应用到许多方面，研制成各种形式的干涉仪，如泰曼-格林干涉仪和傅里叶分光计。

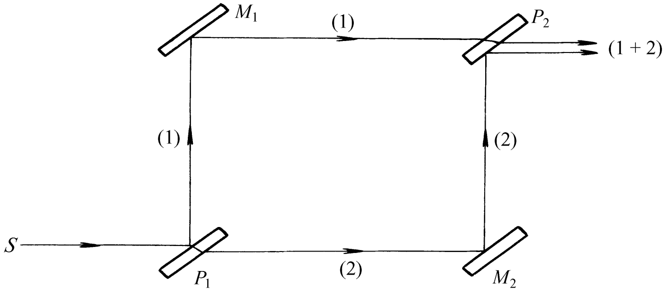
泰曼-格林干涉仪　Twyman-Green interferometer　泰曼-格林干涉仪是检测光学元件的重要仪器，由 L_1 给出一束平行准单色光，经分束板 P 分成两束相互垂直的反射光和透射光，前者入射到平面镜 M_1 后，沿原路返回再经分束板到达投射物镜 L_2。透射光束经过处于最小偏向角位置的棱镜 P_2 后，垂直入射到平面镜 M_2 上，经 M_2 反射后，经原路返回，并由分束板 P 反射到达投射物镜 L_2。若棱镜是完善的，则在 L_2 后焦平面处看到一均匀的视场，如



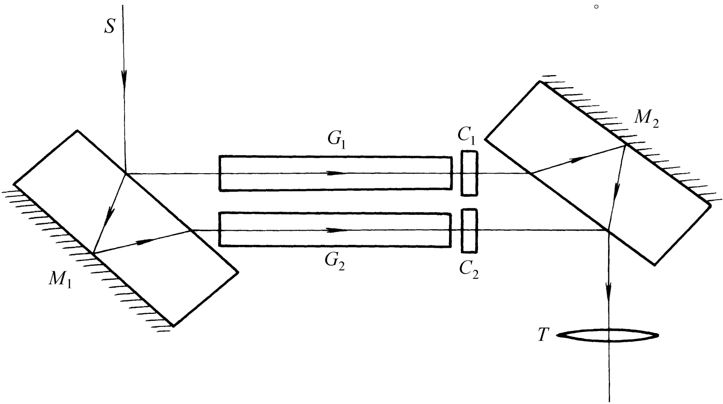
棱镜有缺陷，两次通过棱镜的平行光的波面发生形变，与 M_1 反射的光发生干涉。被检测的光学元件可以是平板或透镜。

马赫-曾德干涉仪　Mach-Zehnder interferometer　其结构如图所示，是根据分振幅原理研制的。有两个分束板 P_1，P_2 和两个平面镜

M_1，M_2。从光源 S 发出的光经分光板 P_1 的前表面分为两束平行光，经过平面镜反射，到第二个分光板 P_2 后相遇产生干涉。一般来说，M_1 和 M_2 是可调的，这种干涉仪的特点是两光束分得很开，虽然制造工艺和调节方面比较困难，但用途很广泛，特别在空气动力学中研究气流的折射率的变化很有价值。稍加修改，可构成全息空间滤波器。在光通量的利用率上，它比迈克尔逊干涉仪高约一倍。



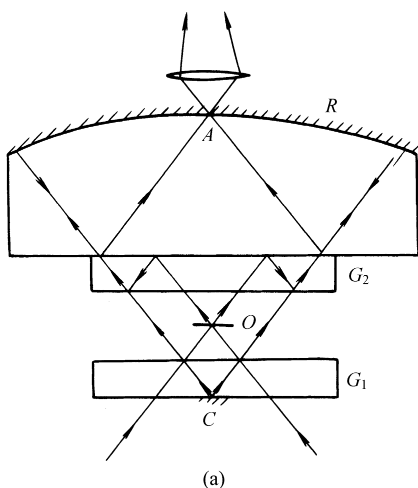
雅满干涉仪 Jamin interferometer 该仪器主要由两块同样厚度、同样折射率的平行平面玻璃板组成，板面 M_1 和 M_2 镀了不透明的银膜。从扩展准单色光源 S 发出的一束光，以约 45°角入射，产生两束光，在望远镜的焦平面上重新会合，产生干涉图样。两板的厚度可使当加上光阑时，二光束可分开，并放入气室和补偿板，其干涉亮条纹为 $\frac{\cos\phi}{\sqrt{n'^2-n^2\sin^2\phi}}\psi=\frac{m\lambda_0}{2n^2h\alpha}$，$|m|=0,1,2,\cdots$，$\psi=$ 常数的轨迹为水平等距的。用白光条纹可识别零级条纹，广泛用于气体折射率的测量。



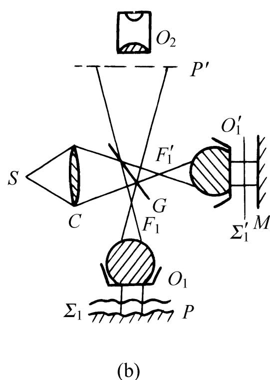
干涉显微镜 interference microscope 显微镜和干涉仪的联合装置，戴森（J. Dyson）研制出了透射式干涉显微镜，如图（a），待测物体放在一玻璃载物片上，置于相同的两块玻璃板 G_1、G_2 中间 O 处，在 G_1 的上表面镀有部分透射的银膜，在下表面中央 C 处有一个很小的镀银的、不透明的金属膜，在 G_2 的上下两个表面镀有部分透射的金属膜，在板 G_1 和 G_2 之间填充与载物玻璃相同的折射率的媒质。这个装置由显微镜的光照明，聚光镜使光在 O 点的平面上会聚成光源的像。一部分光通过物（物光）经 G_2 上下两表面反射后射出，另一部分（参考光）经 G_1 的上表面反射后会聚到 C；它从 C

反射后，经过 O 的外围，直接透过 G_2，G_2 与一玻璃块胶合，在玻璃块上表面为一球面，其上镀有不透明的金属膜，在轴点处有一小孔 A，使物光束和参考光束均会聚于 A。在 A 附近，参考光束形成光源的一个实像 σ_1，物光束则形成光源的一个实像 σ_2，同时叠加在物平面的实像 ψ。ψ 用普通显微镜来观察，σ_1 和 σ_2 的对应点是光源同一点的像。这一对应点是相干的次光源，当将物放在 O 处，物光束到 P 点的光程约增加 $(n'-n)l$，在准单色光下将引起 ψ 上强度的变化，在白光下将引起 ψ 上颜色的变化，通过显微镜观察 A 附近干涉色的变化来看清透明物体的细节。

林尼克设计的反射式干涉显微镜如图(b)所示。显微镜照明光被分束器 G 分成两部分。一部分光被反射向下，通过物镜 O_1 后照明被研究的物体 P 后被反射后再次通过物镜 O_1 和分束器 G 射向目镜 O_2；另一部分光透过分束器 G 和物镜 O_1' 被反射镜 M 反射，沿原路返回，再次经 G 反射后射向物镜 O_2。如果反射镜 M 与物体不垂直，则在目镜 O_2 中能观察到一组干涉条纹，测定其移动量可确定反射物体 P 表面的光洁度。



(a)



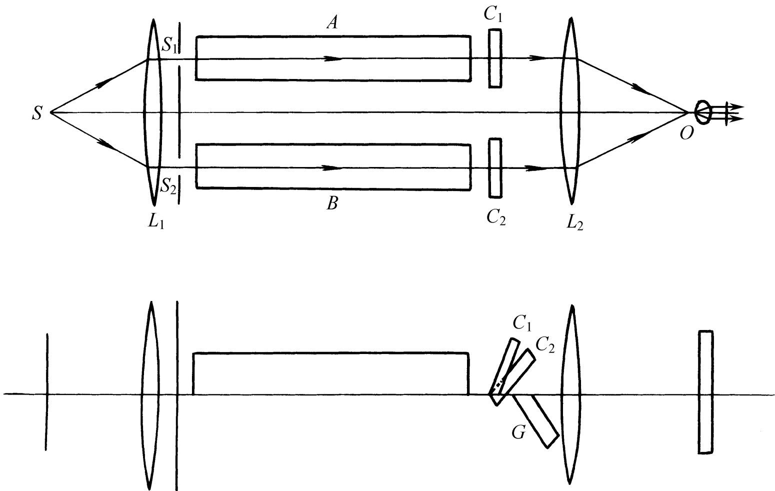
(b)

透射式干涉显微镜　interference microscope in transmitted light　见“干涉显微镜”。

反射式干涉显微镜　interference microscope in reflected light　见“干涉显微镜”。

瑞利干涉仪　Rayleigh interferometer　根据波前分割法制成的干涉仪，A 和 B 是两个气体容器，L_1 为准直透镜，C_1 和 C_2 为补偿器，可直接读出光程差的变化。使用前应将容器抽成真空，调成零位，在容器内分别充以折射率为 n_A 和 n_B 的气体，两支光路将产生光程差：$\Delta=(n_B-n_A)d$，其中 d 为容器的长度，这时条纹的极值位置将要移动，移动量为 $x=e\dfrac{\Delta}{\lambda_0}$，条纹的移动数为：$\Delta m=\dfrac{x}{e}=\dfrac{\Delta}{\lambda_0}$，如果计数 Δm 已知，便可求出折射率差 (n_B-n_A)。由白光的零级极大可定出零级极大的位置，还可用来研究气体折射率随气压和温度变化的规律。参见下页图。

傅里叶干涉分光计　Fourier interference spectrometer　它利用迈克尔逊干涉仪可以改变光程差的特点来测定光源的光谱组成的仪器。设光源的光谱密度 $S'(\nu)$，当两相干光束的强度相同光程差为 Δ 时，光电接收器测得的干涉场强度为



瑞利干涉仪

$$I(\Delta)=C'\int_0^{\infty}S'(\nu)\left[1+\cos\left(2\pi\frac{\nu}{c}\Delta\right)\right]\mathrm{d}\nu,$$

令 $I(0)=2C'\int_0^{\infty}S'(\nu)\mathrm{d}\nu$，则

$$G(\Delta)=I(\Delta)-\frac{1}{2}I(0)$$

$$=C'\int_0^{\infty}S'(\nu)\cdot\cos\left(2\pi\frac{\nu}{c}\Delta\right)\mathrm{d}\nu,$$

写成傅里叶变换的形式

$$S'(\nu)=\frac{2}{cC'}\int_{-\infty}^{\infty}G(\Delta)\exp\left(j2\pi\frac{\nu}{c}\Delta\right)\mathrm{d}\Delta$$

仪器的分辨本领只取决于 Δ 的最大变化量，在提高分辨本领的同时，基本上保持进入仪器的辐射通量和功率不变，可获得较高的信噪比，适合于分析光源较弱而光谱结构复杂的气体光谱和远红外光谱。

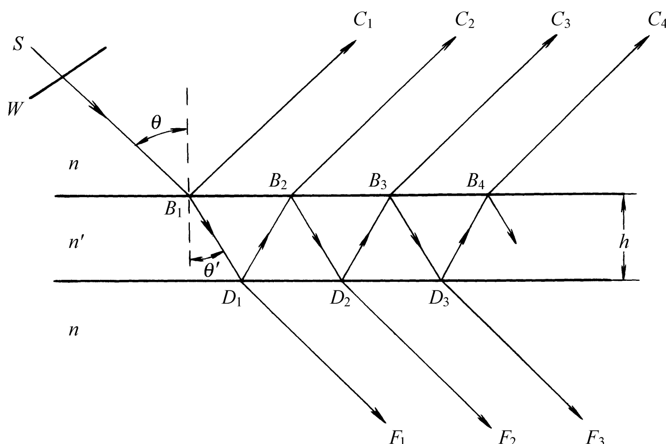
平面平行板的多光束干涉条纹 multiple beam fringes with a plane parallel plate　考虑一块平行平面透明板，其折率为 n'，现有一平面波以 θ 角入射，经多次反射和透射后，可获得多束相干的平行光，相邻相干光间相位差相等，$\delta=\frac{4\pi}{\lambda_0}n'h\cos\theta'$，式中 h 为板的厚度，λ_0 为真空中的波长。设平板反射率为 R，透射率为 T，这些相干光经透镜会聚后在焦平面上叠加干涉，形成等倾干涉条纹。其反射光的强度为

$$I(r)=\frac{4R\sin^2\frac{\delta}{2}}{(1-R)^2+4R\sin^2\frac{\delta}{2}}I(i),$$

透射光的强度为

$$I(t)=\frac{T^2}{(1-R)^2+4R\sin^2\frac{\delta}{2}}I(i),$$

以上两式称为艾里公式，引入参量 $F=\frac{4R}{(1-R)^2}$，改写为反射图样的强度分布为 $\frac{I(r)}{I(i)}=\frac{F\sin^2\frac{\delta}{2}}{1+F\sin^2\frac{\delta}{2}}$，透射图样为 $\frac{I(t)}{I(i)}=\frac{1}{1+F\sin^2\frac{\delta}{2}}$，显然，这两个图样是互补的。当 $R\to1$，使 F 很大，则干涉图样为一系列锐细的条纹。



法布里-珀罗干涉仪 Fabry-Perot interferometer　根据分振幅原理制成的多光束干涉仪。它是由平行放置的两块平面板组成,在两板相对的平面上镀有高反射系数的薄膜,要求镀膜的两平面与理想的两平面的偏差不超过 1/20 至 1/50 波长,为了消除两平板相背的平面上反射光的干涉与所研究的干涉重叠,每块板的两面成一很小的夹角,若两镀膜的平面由热膨胀系数很小的材料固定,则称该仪器为法布里-珀罗标准具,若镀膜面间距可改变,则称为法布里-珀罗干涉仪。标准具是研究光谱精细结构的重要工具,有时也将法布里-珀罗标准具称为法布里-珀罗光谱仪。准单色扩展光源放置在透镜 L_1 的焦平面上,平行光束则在两镀膜的表面上多次反射,形成多个平行的反射光和多个平行的透射光,相邻光的相位差都相等,这样就构成了多束相干光,在透镜 L_2 的焦平面上形成一组锐细的干涉条纹。法布里-珀罗干涉仪有三个重要特征参量:

(1)对比度:它描述干涉条纹的清晰程度,定义为干涉条纹中光强的极大值与极小值之比 $\frac{(I_t)_{\max}}{(I_t)_{\min}}=1+F$,由 F 定义(见"平面平行板多光束干涉条纹")知 R 愈大则 F 也愈大,即增加镜子的反射率可加大干涉条纹的对比度。

(2)锐度:引进条纹的半宽度 $\Delta\phi$ 来描述干涉条纹的锐细程度,$\Delta\phi=\frac{4}{\sqrt{F}}$,$R$ 愈大,则 F 愈大,相应的 $\Delta\phi$ 愈小,即条纹越细锐。相邻条纹的间隔与半宽度之比称条纹细度 $\mathfrak{F}=\frac{\pi\sqrt{F}}{2}$。

(3)峰值透射率　它描述条纹的亮度,定义为亮条纹的强度 $I(t)$和干涉仪移出后的对应强度 $I(i)$的比值,即 $\tau=[I(t)/I(i)]_{\max}$。

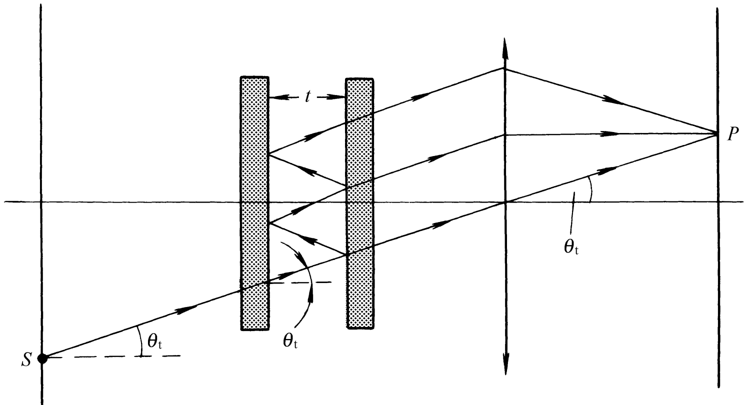
法布里-珀罗标准具 Fabry-Perot etalon　见"法布里-珀罗干涉仪"。

法布里-珀罗光谱仪 Fabry-Perot spectroscopy　见"法布里-珀罗标准具"。

法布里-珀罗干涉仪的应用 applications of the Fabry-Perot interferometer

(1)研究光源光谱成分的精细结构

法布里-珀罗干涉仪能够获得很细的亮纹,可用于研究光谱的精细结构。因干涉级 $m(i)=\frac{2}{\lambda_0}d\times\sqrt{n^2-\sin^2 i}$,对非常接近的相邻光谱成分 λ_1 和 λ_2,各自形成一组环形条纹。对同一级亮纹的 i 值差 δi 也很小,如果与条纹本身宽度 $\delta' i$ 近似相等,则合强度中的凹陷消失,这是临界情况。其相应的波长差称为可分辨的波长差。法布里-珀罗干涉仪分辨本领为 $R_0=\frac{\lambda}{\Delta\lambda_{\min}}=\left(\frac{\pi}{2}\right)m\sqrt{F}$,例如 $d=1\text{cm}$,$\lambda=5\times10^{-5}\text{cm}$,反射率为 0.95,最小可分辨 $\delta\lambda=0.002\text{Å}$。同一



级亮纹间距刚好等于平均波长亮纹间距的波长差 $\Delta\lambda$ 称为干涉仪的色散范围，$G=\Delta\lambda=F\delta\lambda$。它一般需要与普通光谱仪结合使用。

(2)干涉滤色片

在多光束干涉中，$\Delta\phi$ 对 2π 整数倍的微小偏离将导致接近相消干涉，如用白光平面波入射到法布里-珀罗干涉仪入射角 $i=0$，满足 $\lambda_N=\frac{2dn}{N}$ 的波长成分才能无衰减地通过，N 只能取 1、2、3 等少数值。其中只有某一波长落在可见光范围内，这种性质可用来制作滤色片。其透射率曲线中心波长 λ_0 附近的半宽度为 $\frac{\lambda_N^2}{2\pi dn}\times\left(\frac{1-R}{\sqrt{R}}\right)$。

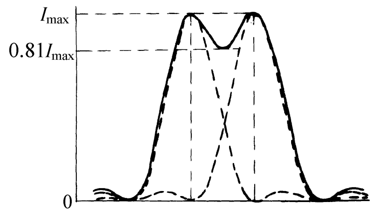
(3)激光器谐振腔

谐振腔是激光器的基本组成之一，除能使同一光束反复多次通过工作物质形成强大的受激辐射之外，还能使辐射的频率集中在很窄的范围内，使之有良好的单色性。这是由于两个镜面形成多光束干涉，只有那些能够发生相长干涉的波长 λ_N 才能在来回反射过程中得到加强。对应于每一个这样的频率称为激光器的一个纵模。选取适当参数可获得单模输出。

分辨本领 resolving power　我们在使用仪器时需要知道最小可分辨的波长差 $\Delta\lambda_{\min}$，希望 $\frac{\Delta\lambda_{FSR}}{\Delta\lambda_{\min}}$ 愈大愈好。当两个波长极大的相位间隔为一个条纹的半宽度时，则认为这两个波长是可分辨的 $\Delta\lambda_{\min}=\frac{2\lambda}{m\pi\sqrt{F}}$，式中 $F=\frac{4r^2}{(1-r^2)^2}$。因此定义分辨本领为

$$R_0=\frac{\lambda}{\Delta\lambda_{\min}}=\left(\frac{\pi}{2}\right)m\sqrt{F}$$

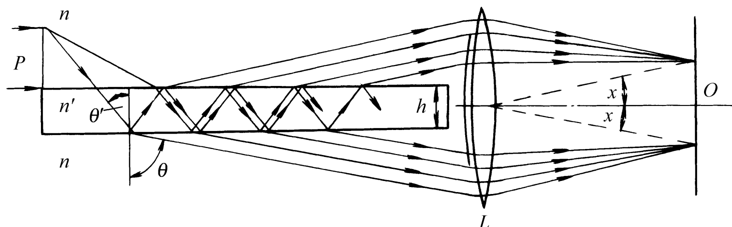
分辨本领与反射系数有关，反射系数愈大，分辨本领愈大。



自由光谱程 free spectral range　设波长为 λ_1 和 λ_2($\lambda_2>\lambda_1$)的两光射到 F-P 标准具上，它们各自产生一组同心圆条纹。对同级数的亮条纹，λ_2 的条纹直径比 λ_1 的大些，当 λ_1 和 λ_2 的差别 $\Delta\lambda=\lambda_2-\lambda_1$ 增加时，可发生 λ_2 的 k 级落到 λ_1 的 $k+1$ 级上，取近似可得 $\Delta\lambda=\frac{\lambda^2}{2t}$，式中 t 为标准具两板的间距，$\Delta\lambda$ 为不产生级次交叠的所允许的最大波长范围，我们称 $\Delta\lambda$ 为标准具常数或称为标准具的自由光谱程。在应用标准具时，此 $\Delta\lambda$ 也是照明光源最大允许的波长范围。

陆末-盖耳克干涉仪 Lummer-Gehrcke interferometer　分振幅原理制成的平行平板多光

束干涉仪是由一端带有输入棱镜 P 的玻璃(或石英)平板组成。当入射的平行光束通过棱镜进入平板后,如果在平板内表面上的入射角接近临界角,反射率接近于1。利用此原理获得两个表面的高反射率,可消除第一束反射光,使反射光束或透射光束均可产生多光束干涉。



双光束干涉 two-beam interference 设两束振幅为 A 的相干光波在交叠区域内任意点 P 处的合光强为 $I=4A^2\cos^2\dfrac{\delta}{2}$,式中 δ 为两束相干光在 P 点的相位差。光强随 δ 的变化缓慢,干涉条纹较宽。

等幅多光束干涉 equal multiple beam interference 多束相干光波在交叠区域内产生的干涉。设振幅为 A 的多束相干光在交叠区域内任意点 P 处所产生的合光强为 $I=A^2\dfrac{\sin^2\frac{N\delta}{2}}{\sin^2\frac{\delta}{2}}$,式中 δ 为相邻两光束间的相位差,N 为相干光波的数目。其特点是在相邻的主极大之间有 $N-1$ 个极小,$N-2$ 个次极大。当 N 增大时,主极大变化锐利,光强变化大,干涉条纹变细。

光的相干条件 interference condition of light 频率相同的两束或多束光波在相遇点有相同的振动方向和固定的相位差,这是产生干涉的必要条件。为了产生清晰的干涉条纹,相干光波在相遇点所产生的振幅差不能悬殊,光程差不能太大,应小于光波的相干长度,这两者是获得干涉的补充条件。由于普通光源的发光是随机的,我们总是将同一光源发出的光分成两个或两个以上的相干光束经不同的路径后再相遇,有固定的相位差可产生干涉。

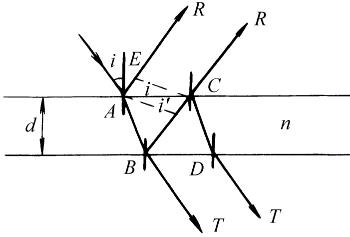
相干光波 coherent light wave 满足相干条件的光波称为相干光波。采用两种方法获得相干光波:(1)波前分割法,将点光源产生的波阵面分割为两部分或多个部分,分别经历不同的路程后再相交,在交叠区域内产生干涉,杨氏实验是一典型例子;(2)振幅分割法,利用振幅分解的方法将同一光源发出的波列分解成两个或多个相干的波列。光的反射和折射是自然实现振幅分割的方法。

分波阵面干涉 wave-front splitting interference 用分割入射光的波阵面的方法产生的干涉,仅适用于单色点(线)光源辐射的光波。著名的杨氏实验、菲涅耳双棱镜实验都是分波阵面干涉。

分振幅干涉 amplitude-splitting interference 通过分割入射光的振幅所产生的干涉,仅适用于单色扩展光源,著名的薄膜实验、迈克尔逊和法布里-珀罗干涉仪产生的干涉都是分振幅干涉。

薄膜干涉 thin film interference 设有一透明薄膜其折射率为 n_0,一光束入射于膜表面 A 处,入射角为 i,经多次反射和折射后,沿反射方向和折射方向可得到两组相干的光束,相邻两条反射光之间的光程差为 $\Delta=2nd\cos i'$,式中 d 是 A 点膜的厚度,i' 为折射角。如令单色发散光束照射到匀质的平行膜上,则 nd 为一常量,显然,光程差由入射角 i 所决定,干涉的极大值和极小值将在不同的倾角方向出现,这种干涉现象称为等倾干涉。由于这种干涉条纹是等倾角光线的交点的轨迹,故称为等倾干涉条纹。如果为一匀质劈形膜,采用一定的装置使在整个视场中入射角保持一定,则光程差完全取决于膜的厚度,膜上相同厚度的点的反射光有相同的光程差。观察到的干涉条纹是有相同厚度点的轨迹,这样的条纹称为等厚干

涉条纹,这类干涉称为等厚干涉。



等厚干涉 interference of equal thickness 见"薄膜干涉"。

等倾干涉 interference of equal inclination 见"薄膜干涉"。

等厚干涉条纹 interference fringes of equal thickness 见"薄膜干涉"。

等倾干涉条纹 interference fringes of equal inclination 见"薄膜干涉"。

牛顿环 Newton ring 英国物理学家牛顿于1675年观察到的等厚干涉条纹。以被测透镜的下表面与标准平晶上表面的接触点为中心的一个变厚度的空气薄膜当平行的单色光垂直入射时,其上形成等厚的干涉条纹,称为牛顿环。一般用于检验透镜的表面的半径和质量。

惠更斯原理 Huygens principle 荷兰物理学家惠更斯于1690年提出,认为初始波阵面上的每一点均可作为新的次波源,下一时刻的新的波阵面则为这些子波阵面的包络,子波的传播速度和频率都与初始波相同。由这种波源发出的波称为次波,由此可以说明波在媒质中传播的方向,惠更斯原理仅仅阐明不同时刻波阵面之间的几何关系。

次波 wave let 见"惠更斯原理"。

波阵面 wave front 在某一时刻从波源向外发出的波所到达的空间内,具有相同相位的点所组成的面称为波阵面。有时又称为等相面。

分束器 beam splitter 可将一束光分成两束光或多束光的元件,通常是由金属膜或介质膜构成。

增透膜 anti-reflecting film 当光入射到媒质的分界面时,会发生光的反射,当膜的光学厚度为 $\lambda_0/4$ 的奇数倍,并且垂直入射时,单层增透膜的反射率为 $R=(n_0n_2-n_1^2)^2/(n_0n_2+n_1^2)^2$,式中 n_1 为膜的折射率,n_0、n_2 分别为膜的两侧媒质的折射率。如果 $n_1^2=n_0n_2$,则 $R=0$,表示由膜的上下两表面的反射光强度相等,相位相反,产生相消干涉使反射光消失,透射光增强。为使在较宽的光谱区内增加透射率,现已研制出多层增透膜。

多层全反射膜 multi-layer antireflection coatings 在折射率为 n_g 的基片上镀以光学厚度为 $\lambda_0/4$ 的高折射率 n_H 的膜层 H 后,由于两界面的反射光同相位,反射率大大增加。用高(H)、低(L)折射率交替的、每层厚度为 $\lambda_0/4$ 的多层介质膜,其反射率为 $R=\left[\dfrac{1-(n_H/n_L)^{2S}(n_H^2/n_g)}{1+(n_H/n_L)^{2S}(n_H^2/n_g)}\right]^2$,$n_H/n_L$ 比值愈大,层数愈多,则反射率愈高。当然,膜层数达到一定时,由于吸收、散射的增加而使反射率下降。其结构为 $g(HL)^m a$,式中 a 为空气媒质,g 为镀膜的基片。

在膜堆的一面镀 H 层,其结构为 $g(HL)^m Ha$,可使某一波段内反射光产生相长干涉。在膜堆的两面涂一层八分之一波长的 L 层,其结构为 $g(L/2)(HL)^m(L/2)a$,可使某一波段内反射光产生相消干涉。

干涉滤光片 interference filter 能滤出某一波段单色光的光学器件,采用的多层介质膜,其结构为 $gHLHLLHLHa$,或 $gHLHLHHLHLHa$,其反射率和透射率均随波长而变。介质膜能使某一波段光具有高的透射率,而其他波段光的透射率几乎为零,这种干涉滤光片称为透射式干涉滤光片。反之,如果干涉滤光片仅使某一颜色的光波产生最大的反射率,其他波段光的反射率为零,这种干涉滤光片称为反射式干涉滤光片。最典型的例子为法布里-珀罗干涉滤光片。

见"多层全反射膜"。

透射式干涉滤光片 transmission interference filter 见"干涉滤光片"。

反射式干涉滤光片 reflection interference filter 见"干涉滤光片"。

金属反射膜 metal reflectance films 镀制金属反射膜常用的材料有铝(Al)、银(Ag)、

金(Au)等。铝是紫外到红外都有很高反射率的惟一材料,铝膜表面在大气中可生成一层薄的氧化铝(Al_2O_3),所以膜比较牢固、稳定,得到广泛的应用。金膜常用于红外反射镜,常用铬膜作衬底以增加与玻璃的附着性。近来采用在金属膜上镀几对高、低折射率交替的介质膜的方法,不仅保护了金属膜不受大气侵蚀,更重要的是减少了金属膜的吸收,增加它的反射率。

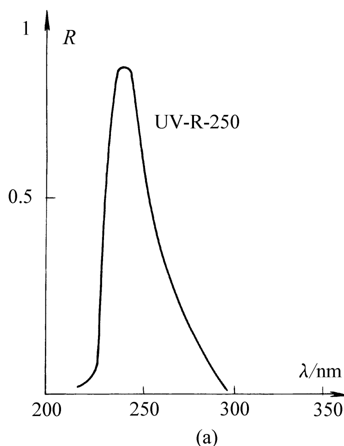
低损耗激光反射镜 low loss laser reflectance mirror 多层介质反射镜的反射率理论上可无限接近于100%,实际上则不可避免地存在吸收和散射损耗,这限制了反射镜的极限反射率。激光器特别是低增益的气体激光器的输出功率在很大程度上依赖于构成谐振腔的激光反射镜的反射率,反射率的进一步提高,只能以减少膜层中光学损耗来实现。膜层的吸收不仅与材料的消光系数有关,而且与膜内电场强度分布有关。对消光系数为 $k_H=3\times10^{-4}$, $k_L=9\times10^{-5}$的 ZnS/MgF_2 反射镜,经计算结构为 $G(HL)^8A$ 的吸收为 $A=0.21\%$,而结构为 $G(HL)^8HA$ 的吸收仅为 $A=0.072\%$,这表明减少吸收的途径。散射损耗分为两类,即体积散射和表面散射。使用特殊工艺,现已能制造出反射率高达99.89%,散射率为0.09%的反射镜。对镀膜材料进行适当组合可用作激光高反射膜和激光宽带高反射膜。用电子枪镀制激光反射膜称为“硬”膜,它只有通过抛光才能除去。一般用蒸发镀制的反射膜,在稀酸中能被溶解,称为“软”膜。

软膜 soft films 见“低损耗激光反射镜”。

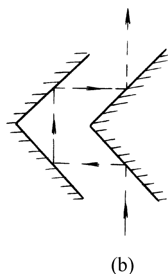
硬膜 hard films 见“低损耗激光反射镜”。

中性干涉滤光片 neutral interference filters 从0.1量级(透射率为80%)的低密度(弱吸收)到4(透射率为0.01%)的光学密度板。在280~1200nm 的宽广光谱区内,光的衰减是相同的。

紫外干涉滤光片 ultraviolet interference filters 在广阔的紫外光谱区内可任意选择通带位置,我们能制造200nm 和更远的滤光片。特别令人感兴趣的是反射滤光片,因为它们不介入基板的吸收。图(a)为反射干涉滤光片反射率特性曲线,图(b)为紫外反射干涉滤光片。



(a)


(b)

红外干涉滤光片 infrared interference filters 随着探测技术的发展,红外光谱区得到广泛应用,在这个光谱区内可制成任意波长的狭通带滤光片,根据需要选择不同的截止波长也可制成高通滤光片或低通滤光片。图(a)中曲线(1)为红外区高通干涉滤光片的透射特性曲线,曲线(2)为低通干涉滤光片的透射特性曲线。将这两种滤光片组合使用可得到有相当宽的通带滤光片。

投影系统中为了保护影片或幻灯片,采用在

可见区具有良好的透射率或良好的反射率并在红外区有强烈吸收的滤光片，图(b)所示为棱镜特性曲线。

(a)

(b)

五、衍　射
Diffraction

惠更斯-菲涅耳原理 Huygens-Fresnel principle 球面波衍射理论在处理球面波衍射问题中应用最广泛，它是在惠更斯原理的基础上加上了相干性这一重要概念形成的。菲涅耳认为空间任一点光场的复振幅是所有子波在该点相干叠加的结果。为进行定量的计算，菲涅耳提出了以下假设：

(1)点光源 S 发出的球面波是严格的单色的球面波，每一面元可看做新的相干次波源；

(2)波阵面上的任一点的复振幅为点源自由传播到 P 点的复振幅；

(3)面元发出的次波的复振幅与 $k(x)$ 成正比，$k(x)$ 为倾斜因子，它表示发出的次波不是各向同性的；

(4)有障碍物时，由障碍物所遮去的那部分波阵面对 P 点的振动无贡献，同时也不考虑障碍物对附近光场的影响。

基于以上假设，在 P 点产生的复振幅为

$$u(P)=\iint A\frac{e^{ik\rho}}{\rho}k(x)\frac{e^{ikr}}{r}d\sigma$$

式中 $A\dfrac{e^{ik\rho}}{\rho}$ 表示一点源 S 在各向同性均匀介质中传播距离 ρ 后波阵面上的复振幅，$\dfrac{e^{ikr}}{r}$ 表示由子波发出的球面波，r 是子波源到考察点 p 的距离，$k(x)$ 为菲涅耳引进的倾斜因子，$d\sigma$ 为面积分元。

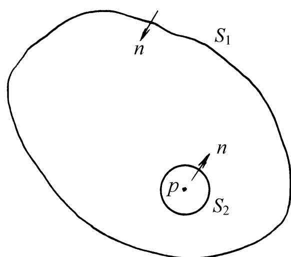
基尔霍夫积分定理 integral theorem of Kirchhoff 基尔霍夫采用势论方法，从定态波场亥姆霍兹方程出发，利用格林公式得到辐射场中任一点 p 的复振幅 $u(P)$ 由包围 p 点任一封闭面上的 u 和 $\dfrac{\partial u}{\partial n}$ 推导出来

$$u(P)=\frac{1}{4\pi}\iint_{S_1}\left[u\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{e^{ikr}}{r}\right)\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{n}-\frac{e^{ikr}}{r}\nabla u\right]\cdot\boldsymbol{n}d\sigma$$

上式为基尔霍夫积分定理的数学表达式。选取适当边界条件和作某些近似，可得到：

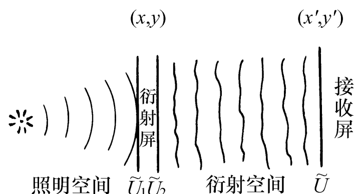
$$u(P)=\frac{ikA}{4\pi}\iint_A\frac{e^{ik(r+\rho)}}{r\rho}(\cos\beta-\cos\alpha)d\sigma$$

上式称为菲涅耳-基尔霍夫衍射积分公式



光的衍射　diffraction of light　光在传播过程中遇到障碍物时发生偏离直线传播的现象称为衍射或绕射。按惠更斯–菲涅耳原理，衍射的发生是由于光在传播过程中波面受到某种限制，改变了波面的复振幅分布。能使波前的复振幅发生改变的障碍物统称为衍射屏。衍射屏可以是反射物，也可以是透射物。以衍射屏为界，前部为照明空间，一般照明光波是平面波或球面波；后部为衍射波场，衍射光波的等相面和等幅面一般不重合，是非均匀波。对衍射系统，着重研究衍射屏后的光场分布和接收屏上的光场分布。设衍射屏前的波前为 $\tilde{U}_1(x,y)$，经衍射屏后变为 $\tilde{U}_2(x,y)$，在接收屏上的波前为 $\tilde{U}(x,y)$，可以看出衍射改变和变换了波前。

我们定义函数 $t(x,y)=\dfrac{\tilde{U}_2(x,y)}{\tilde{U}_1(x,y)}$ 来表示衍射屏的作用，对透射屏，$t(x,y)$称为复振幅透射率函数，对反射屏，称它为复振幅反射率函数。一般屏函数为一复数，$t(x,y)$的幅角为常数的衍射屏称为振幅型衍射屏，如各种形状的孔和遮光屏都是振幅型衍射屏，$t(x,y)=\begin{cases}1, & \text{透光部分}\\ 0, & \text{遮光部分}\end{cases}$，如 $t(x,y)$的模为常数的衍射屏称为相位型衍射屏。



薄透镜是相位型衍射屏，其屏函数为

$$t(x,y)=\exp\left[\frac{-ik(x^2+y^2)}{2f}\right]。$$

屏函数　screen function　见“光的衍射”。

振幅型衍射屏　amplitude diffraction screen　见“光的衍射”。

相位型衍射屏　phase diffraction screen　见“光的衍射”。

衍射屏　diffraction screen　见“光的衍射”。

绕射　diffraction　见“光的衍射”。

夫琅禾费衍射　Fraunhofer diffraction　为了能够计算一般的衍射图必须取一定的近似，通常取菲涅耳近似和夫琅禾费近似，其相应的衍射区内光波的行为分别称为菲涅耳衍射与夫琅禾费衍射。随着传播距离的增加，辐射图样分布逐渐偏离几何光学的传播规律，这时菲涅耳近似开始生效，故从此开始至无穷远处均称为菲涅耳衍射区，当随距离增加衍射图样相对强度关系不再改变，这个区域称为夫琅禾费衍射区，夫琅禾费衍射区是包含在菲涅耳衍射区之中。由于夫琅禾费衍射的计算比较简单，因此人们将它单独归为一类，近来发展起来的傅里叶光学给予夫琅禾费衍射以新的意义。

菲涅耳衍射　Fresnel diffraction　见“夫琅禾费衍射”。

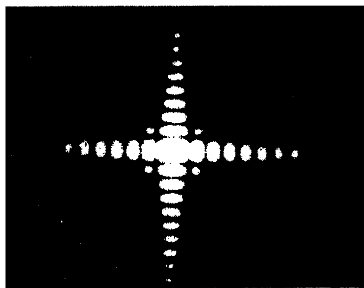
矩形孔衍射　diffraction by a rectangular aperture　对矩形孔其复振幅透射率为 $t(x_0,y_0)=\mathrm{rect}\left[\dfrac{x_0}{a}\right]\times\mathrm{rect}\left[\dfrac{y_0}{b}\right]$，式中 a 和 b 分别为矩形孔的长度和宽度。用单位振幅的单色平面波垂直入射，孔径上的场分布为 $U(x_0,y_0)=t(x_0,y_0)$，则其夫琅禾费衍射强度分布为

$$I(x,y)=I(0)\sin c^2(\alpha)\sin c^2(\beta)$$

其中 $\alpha=\dfrac{\pi a\sin\theta_1}{\lambda}$，$\beta=\dfrac{\pi b\sin\theta_2}{\lambda}$。下页图为一二维衍射图样，衍射孔径愈小则衍射现象愈明显，这类衍射称为夫琅禾费矩形孔衍射，简称矩形孔衍射，观察到的场分布等于孔径上场分布的傅里叶变换。

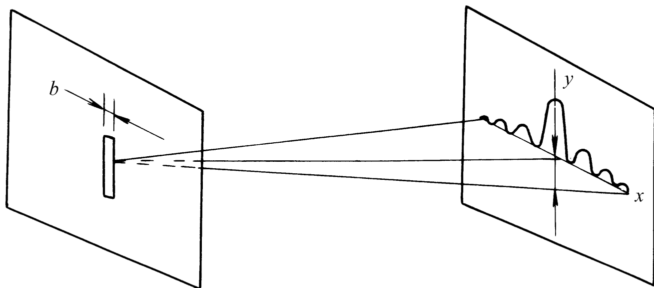
夫琅禾费矩形孔衍射　Fraunhofer diffraction by a rectangular aperture　见“矩形孔衍射”。

单缝衍射　diffraction by a slit　单位振幅的



单色平面波垂直入射于一宽度为 a 的狭缝上，在透镜的后焦平面上的光强分布为 $I(\theta)=I(0)\times\left[\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right]^2=I(0)\operatorname{sinc}^2(\alpha)$，式中 $\alpha=\frac{\pi a\sin\theta}{\lambda}$。衍射图样为一组平行于缝的直条纹。中央条纹最亮，最宽，在它的两侧对称分布着明暗相间的各级条纹，这类衍射称为夫琅禾费单缝衍射，简称单缝衍射。

暗纹的位置为 $\sin\theta=\pm\frac{\lambda}{a},\pm\frac{2\lambda}{a},\pm\frac{3\lambda}{a},\cdots$，以相邻暗纹的角距离作为其亮纹间的角宽度，则亮纹的角宽度为 $\theta\approx\pm\frac{k\lambda}{a}$，($k=1,2,\cdots$)，次极大的位置为 $\sin\theta=\pm1.43\frac{\lambda}{a},\pm2.46\frac{\lambda}{a},\pm3.47\frac{\lambda}{a},\cdots$，强度 $I_1\approx4.7\%I_0$，$I_2\approx1.7\%I_0$，$I_3\approx0.8\%I_0$，…，可见绝大部分光能集中在零级衍射斑内。



夫琅禾费单缝衍射　Fraunhofer diffraction by a slit　见“单缝衍射”。

双缝衍射　diffraction by double slits　当单位振幅的单色平面波垂直入射于两条互相平行的透光狭缝上时，在透镜的后焦平面上形成一组衍射条纹，这类条纹称为夫琅禾费双缝衍射，简称双缝衍射。其光强分布为

$$I=I(0)\left(\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right)^2\cos^2\left(\frac{\pi d\sin\theta}{\lambda}\right)$$

式中 $\alpha=\frac{\pi a\sin\theta}{\lambda}$，$d$ 为双缝上任一对对应点的距离。当 $d\gg a$ 时，其衍射图样为一组平行于狭缝等间距、均匀、宽度相等的条纹。

夫琅禾费双缝衍射　Fraunhofer diffraction by double slits　见“双缝衍射”。

多缝衍射　diffraction by multiple slits　当单位振幅的单色平面波垂直入射于一组等宽等距的平行透光狭缝上时，在透镜的后焦平面上形成一组亮而细锐的衍射直条纹，这类衍射称为夫琅禾费多缝衍射，简称多缝衍射。其强度分布为

$$I=I(0)\left(\frac{\sin\alpha}{\alpha}\right)^2\left[\frac{\sin\left(\frac{N\pi d\sin\theta}{\lambda}\right)}{\sin\left(\frac{\pi d\sin\theta}{\lambda}\right)}\right]^2$$

式中 θ 为衍射角，a 为缝宽，d 为相邻二缝上任意一对对应点间距离，N 为缝数。



夫琅禾费多缝衍射　Fraunhofer diffraction

by multiple slits　见“多缝衍射”。

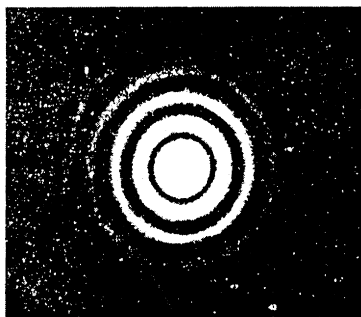
圆孔衍射 diffraction by a circular aperture　用单位振幅单色平面波垂直入射孔径为一半径 R 的圆孔，其透射率为

$$t(r_0)=\mathrm{circ}\left(\frac{r_0}{R}\right)$$

其中 $\mathrm{circ}\left(\frac{r_0}{R}\right)=\begin{cases}1, r\leqslant R\\ 0,\text{其他}\end{cases}$ 为圆域函数。采用极坐标计算，函数 $u(r)$ 的傅里叶变换 $U(\rho)=2\pi\int_0^{\infty} ru(r)\cdot J_0(2\pi r\rho)\mathrm{d}r$，夫琅禾费圆孔衍射的强度为

$$I(r)=I(0)\left[\frac{2J_1\left(\frac{kRr}{z}\right)}{\frac{kRr}{z}}\right]^2$$

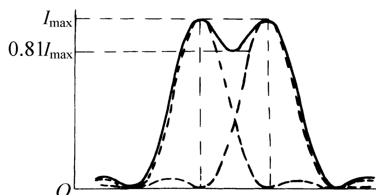
式中 $I(0)=\left(\frac{kR^2}{2z}\right)^2$ 为 $r=0$ 时的强度，在中心处为一亮斑，周围为一同心的明暗相间的圆环，其强度随其亮斑的半径增大而急剧下降，中心亮斑的半径为 $\Delta r=0.61\frac{\lambda z}{R}$，我们称它为艾里图样。我们考虑半径为 w_0 的圆内能量的百分数 $L(w_0)=1-J_0^2(kaw_0)-J_1^2(kaw_0)$，式中 J_0 和 J_1 分别为零阶和一阶贝塞尔函数，约有 84% 的能量落在第一个艾里斑的中心亮区，通常取中心亮斑作为衍射极限。



夫琅禾费圆孔衍射 Fraunhofer diffraction by a circular aperture　见“圆孔衍射”。

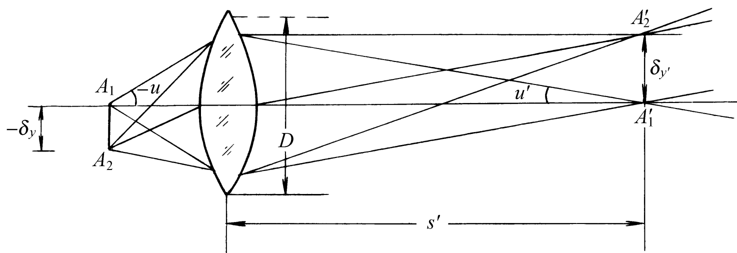
艾里斑 Airy disk　见“圆孔衍射”。

瑞利判据 Rayleigh criterion　我们讨论无像差系统，并假定被成像的物为发光强度相等且独立的发光点。甲衍射图样的中央最大与乙衍射图样的第一最小重合时所对应的两物点间距离为可分辨极限，称这个极限为瑞利判据，如图所示。

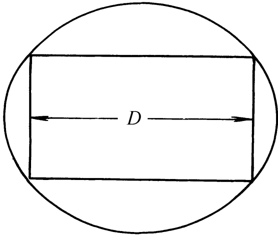


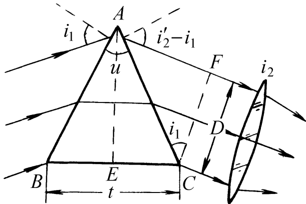
望远镜的分辨率 resolution of the telescopes　望远镜物镜的通光孔径的直径为 D，则它的最小分辨角为 $\theta_1=\frac{1.22\lambda}{D}$。分辨角愈小，则分辨率愈大。由于通光孔径 D 远大于人眼的瞳孔径 d，在用望远镜观察远方物体时提高了对物体的分辨率。

显微镜的分辨率 resolution of the microscopes　显微镜的分辨率为 $\delta_y=\frac{0.61\lambda}{n\sin u}$，其中 $n\sin u$ 为物镜的数值孔径，上式表示物镜的数值孔径和所用的成像光波的波长愈短，则物镜的分辨本领愈大。显微镜的目镜是保证物镜分辨本领的充分利用，所以显微镜的最大分辨本领取决于物镜的分辨本领。

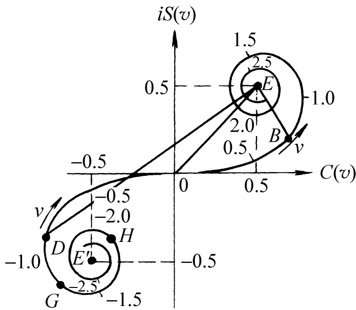


棱镜光谱仪分辨率 resolution of the prism spectrograph 棱镜光谱仪的分辨角为 $\theta_0=\frac{\lambda}{D}$,式中 D 为棱镜在望远镜光轴的垂直平面上的投影宽度。光谱面上任意两光谱线,只要其角距大于或等于 θ_0 角,两光谱线就能被分辨。与 θ_0 对应的两光谱线的波长差 $\delta\lambda$,即该光谱仪所能分辨的最小的波长间隔 $\delta\lambda=\left(\frac{d\lambda}{d\delta}\right)\theta_0$。考虑棱镜处于最小偏向角,则 $\delta\lambda=\frac{\lambda}{t\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}}$,式中 t 为棱镜的底边长度。我们定义光谱的分辨本领为 $R=\frac{\lambda}{\delta\lambda}=t\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda}$,它与棱镜的底边大小和棱镜材料的色散率有关。

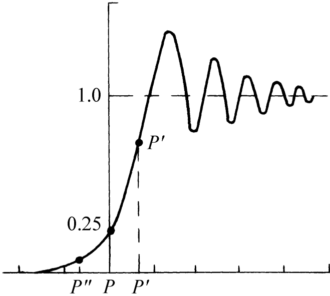




直边衍射 diffraction by a straight edge 一平面波或柱面波通过与其传播方向垂直的不透明直边后,在屏幕上可观察到在几何阴影内一定的范围内光强度不为零、在影界之外的区域光强度有规律的不均匀的分布。在几何照明区域靠近阴影区处形成与屏边相平行的衍射条纹,在远离几何阴影处有光强均匀的分布。这类衍射称为菲涅耳直边衍射,简称直边衍射。可利用考纽螺线来讨论光强分布。



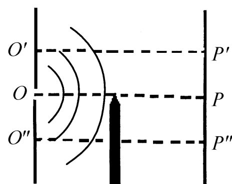
考纽螺线



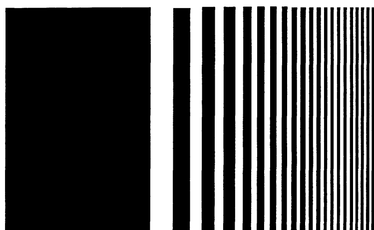
衍射光强分布曲线

菲涅耳直边衍射 Fresnel diffraction by a straight edge 即"直边衍射"。

菲涅耳单缝衍射 Fresnel diffraction by a slit 设 S 为垂直于图面的线光源,NN' 为平行于线光源的狭缝,可把狭缝看做两个相距很近的平行直边屏 N 和 N' 的组合,使线光源发出的柱面波波阵面露出很小的一部分,屏上光强分布由这部分波阵面来决定。其衍射图样可认为是两直边衍射的叠加。利用考纽螺线可研究不透明直条代替狭缝而得到菲涅耳衍射图样。

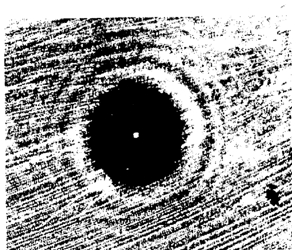


实验光路图



菲涅耳衍射图

圆屏衍射　diffraction by a circular obstacle　在平面波或球面波的传播方向垂直放置一不透明的圆屏，当圆屏的线度与波长可比拟时，光可以绕过障碍物进入阴影区，在几何照明区内出现明暗相间的圆环，如图所示。



这类衍射称为菲涅耳圆屏衍射，简称圆屏衍射。

菲涅耳圆屏衍射　Fresnel diffraction by a circular obstacle　即"圆屏衍射"。

菲涅耳圆孔衍射　Fresnel diffraction by a circular aperture　在平面波或球面波的传播方向放置有一圆孔的不透明的屏，当圆孔的线度与波长可比拟时，光可以绕过障碍物进入阴影区，在几何照明区内出现明暗相间的圆环。这类衍射称为菲涅耳圆孔衍射，简称圆孔衍射。

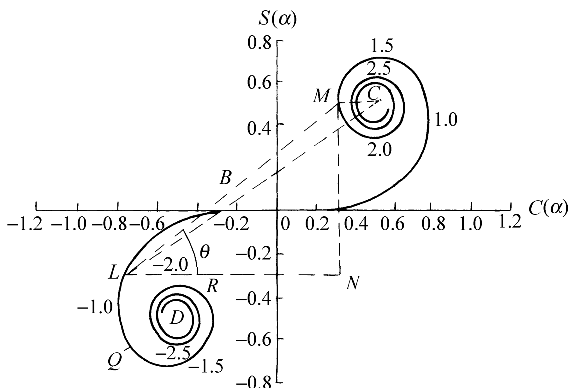
考纽螺线　Cornu spiral　法国实验物理学家考纽应用振幅矢量相加原理讨论柱面波的衍射时绘成的一条曲线称为考纽螺线，横坐标为 $C(\alpha)$，纵坐标为 $S(\alpha)$，α 为曲线线段的长度，考纽螺线具有这样的性质：

$$[C(\alpha_2)-C(\alpha_1)]+\mathrm{i}[S(\alpha_2)-S(\alpha_1)]=B\exp(\mathrm{i}\theta),$$

$$\overline{LN}=C(\alpha_2)-C(\alpha_1)=B\cos\theta,$$

$$\overline{MN}=S(\alpha_2)-S(\beta_1)=B\sin\theta,$$

式中 θ 为 $\overline{LM}$ 与横轴 $C(\alpha)$ 的夹角。利用考纽螺线很容易求得菲涅耳积分的值。



菲涅耳积分 Fresnel integral　菲涅耳积分定义为 $C(x)=\int_0^{\alpha}\cos\frac{\pi t^2}{2}\mathrm{d}t$，$S(x)=\int_0^{\alpha}\sin\frac{\pi t^2}{2}\mathrm{d}t$。菲涅耳积分具有下列性质：

$$C(0)=S(0)=0,$$
$$C(\infty)=S(\infty)=1/2,$$
$$C(-\infty)=S(-\infty)=-1/2,$$
$$C(\alpha)=-C(-\alpha),$$
$$S(\alpha)=-S(-\alpha)。$$

通常菲涅耳积分没有解析解，当 α 较小时，有

$$C(\alpha)=\alpha\left[1-\frac{1}{2!}\frac{1}{5}\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)^2+\frac{1}{4!}\frac{1}{9}\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)^4+\cdots\right]$$

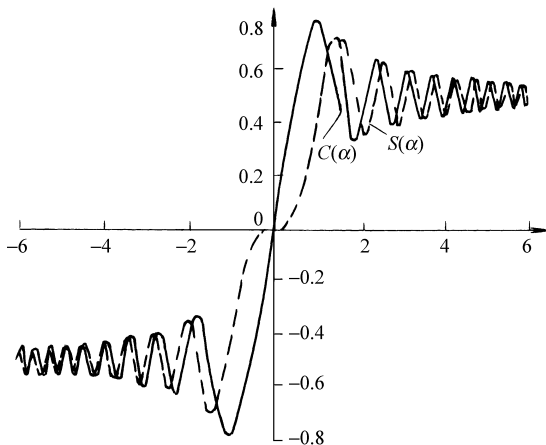
$$S(\alpha)=\alpha\left[\frac{1}{1!}\frac{1}{3}\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)-\frac{1}{3!}\frac{1}{7}\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)^3+\frac{1}{5!}\frac{1}{11}\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)^5-\cdots\right]$$

当 α 很大时，得

$$C(\alpha)=C(\infty)-\frac{1}{\pi\alpha}\times\left[P(\alpha)\cos\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)-Q(\alpha)\sin\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)\right],$$

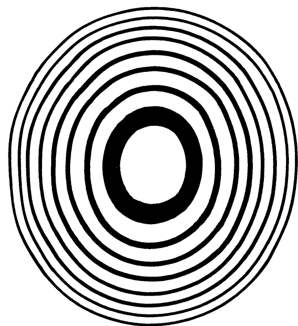
$$S(\alpha)=S(\infty)-\frac{1}{\pi\alpha}\times\left[P(\alpha)\sin\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)+Q(\alpha)\cos\left(\frac{\pi}{2}\alpha^2\right)\right],$$

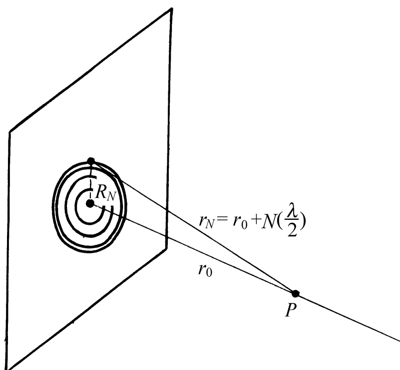
式中 $Q(\alpha)=1-\frac{1\cdot3}{(\pi\alpha^2)^3}+\frac{1\cdot3\cdot5\cdot7}{(\pi\alpha^2)^4}-\cdots$，$P(\alpha)=\frac{1}{\pi\alpha^2}-\frac{1\cdot3\cdot5}{(\pi\alpha^2)^3}+\frac{1\cdot3\cdot5\cdot7\cdot9}{(\pi\alpha^2)^5}-\cdots$。菲涅耳积分的几何表示如图所示。



波带片 zone plate　波带片是一种特殊的衍射屏。研究菲涅耳衍射时，波阵面上每一点都可看做次波源，为确定波阵面在 P 点引起的振动，菲涅耳提出环绕 O 点把波阵面分割成一组环带，使相邻点到 P 点距离相差半个波长 $R_N^2=\left(r_0+\frac{N\lambda}{2}\right)^2-r_0^2$，这样分成的环形带称为菲涅耳半波带，简称半波带。由于相邻两波带的对应点到 P 点的距离相差 $\lambda/2$，在 P 点产生的振动相差半个周期，故又称为菲涅耳半周期带，简称为半周期带。奇数带和偶数带在 P 点产生的振动相位相反，如只有奇数带或偶数带对 P 点有贡献，则在 P 点振动比整个波阵面在 P 点引起的振动的合振幅要大得多。若以不透明的物质遮掉奇数的或偶数的带构成的衍射屏称为波带片。当 $\lambda/r_0\ll1$，波带半径近似为 $R_N=\sqrt{Nr_0\lambda}$，波带片具有聚光作用，$\frac{1}{f_N}$

$=\frac{N\lambda}{R_N^2}$,式中 f_N 是第 N 个焦距,成像关系满足 $\frac{1}{f_N}=\frac{1}{S}+\frac{1}{S'_N}$, S'_N 是波带片到观察点 P 的距离即第 N 个像距, S 为点光源到波带片的距离即物距。对给定的物点,波带片有多个焦距,形成多个像点,而薄透镜仅有一个像点。





菲涅耳半周期带 Fresnel half-period zone 见“波带片”。

半周期带 half-period zone 见“波带片”。

菲涅耳波带片 Fresnel half-wave zone 见“波带片”。

半波带 half-wave zone 见“波带片”。

光栅 grating 屏函数是空间的周期函数的衍射屏,称为衍射光栅。即任何一种装置,只要对入射光的振幅或相位,或振幅与相位二者,形成一个周期性的空间调制,就称之为衍射光栅。按光栅的制造方法,可分为刻划光栅,复制光栅和全息光栅。按光栅的面形,可分为平面光栅和凹面光栅。按对光的透射和反射作用,可分为透射光栅和反射光栅。反射光栅又分为平面反射光栅和凹面反射光栅。

平行光垂直光栅面入射时,由惠更斯–菲涅耳原理可推得夫琅禾费衍射光强度分布

$$I = I_0\left(\frac{\sin u}{u}\right)^2\left(\frac{\sin N\nu}{\sin\nu}\right)^2\cdots\cdots$$

式中 $u=\frac{\pi}{\lambda}a\sin\theta$, $\nu=\frac{\pi}{\lambda}d\sin\theta$。表示由 N 个相干光在该点产生的强度与宽度为 a 的单缝的夫琅禾费衍射在该点所产生的光强的乘积。当 $\nu=k\pi$ 时产生干涉的主极大,其光强为 N^2I_0,即在满足下式方向上有亮条纹出现: $d\sin\theta=k\lambda$,($k=0,\pm1,\pm2,\cdots$),称此式为光栅方程, k 为衍射级, b 为不透光宽度, $d=(a+b)$为光栅常数。当入射光与光栅成 φ 角时,光栅方程为 $d(\sin\varphi\pm\sin\theta)=k\lambda$, + 号表示衍射光和入射光在法线同一侧。由光栅方程可知,对给定的光栅,除零级外,不同波长的同一级主极大均不重合,并且按波长的大小,自零级开始向左右两侧由短波向长波方向散开,形成细锐的亮线,我们称光栅对复色光的衍射图为光栅光谱。将这些亮线称为谱线或光谱线。

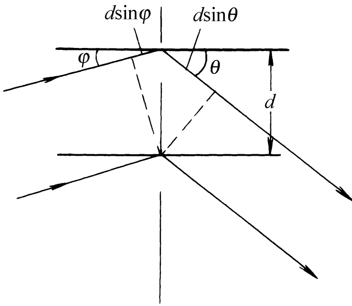
将光栅作为色散系统来研究,它的角色散为 $\frac{d\theta}{d\lambda}=\frac{k}{(a+b)\cos\theta}$,式中可看出角色散与光栅常数成反比,与衍射级成正比。通常最感兴趣的是所用光栅所能分辨的最小的波长差,定义光栅的分辨本领为 $R=\frac{\lambda}{\delta\lambda}=kN$,可以看出分辨本领与光栅的衍射级和光栅的总数目 N 成正比。

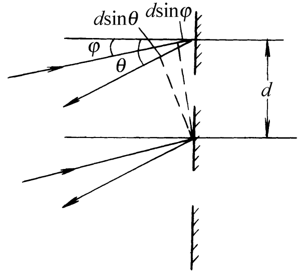
衍射光栅 diffraction grating 见“光栅”。

平面光栅 plane grating 见“光栅”。

透射光栅 transmission grating 见“光栅”。

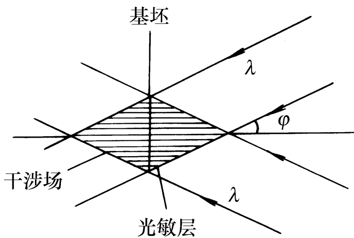
反射光栅 reflection grating 见“光栅”。





复制光栅 replies grating　见“光栅”。

全息光栅 holographic grating　全息光栅与全息没有什么联系，应称做干涉摄影记录的衍射光栅，它是用单色激光的双光束干涉图样代替刀刻划而得到的衍射光栅。它的制备是在基片的面形精度达 λ/10 的表面上涂光敏材料，置于单色激光双光束干涉场内，经曝光，显像并镀反射膜和保护膜即得光栅。与刻划光栅相比，鬼线和杂散光不存在，但闪耀的效率较低。



光栅的分辨本领 resolving power of grating　见“光栅”。

光栅的色散本领 dispersed power of grating　见“光栅”。

光栅方程 grating equation　见“光栅”。

凹面光栅 concave grating　在高反射金属凹面上刻划一系列的平行线条构成反射光栅，具有分光和聚光能力。若将狭缝光源和凹面光栅放置在同一圆周上，且该圆的直径等于凹面光栅的曲率半径，可得到很锐的细光谱线，该圆称为罗兰圆如图(a)。常见的凹面光栅光谱仪有三种装置，即罗兰装置，帕刑装置和依格尔装置。

罗兰装置如图(b)所示，光栅中心和感光板中心固定在可动的连杆两端，连杆的长度为光栅的曲率半径，其两端可沿互相垂直的导轨自由滑动，狭缝装在导轨的交点上。在连杆移动过程中，狭缝、光栅和感光板始终在一罗兰圆上。这种装置的缺点为：只能用移动连杆来读取不同波段的光谱。

帕邢装置的罗兰圆为一圆形钢轨如图(c)，狭缝和光栅都固定在钢轨上，感光板环绕钢轨安装有一排底板架因而可同时拍摄几组光谱，其优点是稳定性高。

依格尔装置如图(d)所示，其入射角等于衍射角，其中缝光源安装在底板架的正上方，要改变波段可将光栅和底板沿相反的方向转动同一角度，改变二者间的距离，使之始终位于罗兰圆上。该装置优点为体积紧凑，通常用于真空紫外光谱仪。

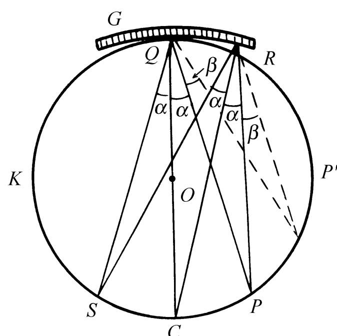
罗兰圆 Rowland circle　见“凹面光栅”。

罗兰装置 Rowland mounting　见“凹面光栅”。

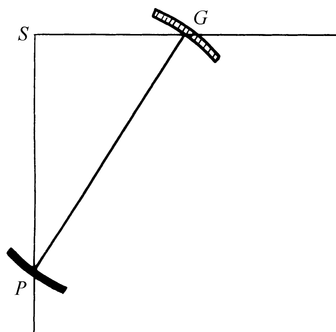
帕邢装置 Paschen mounting　见“凹面光栅”。

依格尔装置 Eagle mounting　见“凹面光栅”。

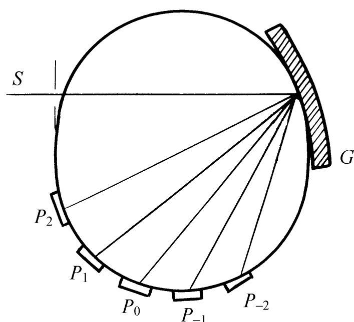
振幅光栅 amplitude grating　在衍射系统内，波前的改变是由于衍射屏的作用，光栅可使照明光波的波前发生改变，因此可用屏函数来表示。一般情况下屏函数为复数，屏函数的幅角为常数的衍射屏称为振幅光栅，其屏函数为 $t(x,y)=\begin{cases}1,\text{透光部分}\\0,\text{遮光部分}\end{cases}$，屏函数的模按正弦



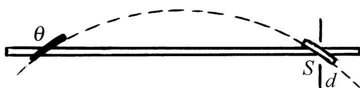
(a)凹面光栅的聚焦(罗兰圆)



(b)凹面光栅的罗兰装置



(c)凹面光栅的帕刑装置



(d)凹面光栅的依格尔装置

形式变化的光栅称为正弦型振幅光栅。

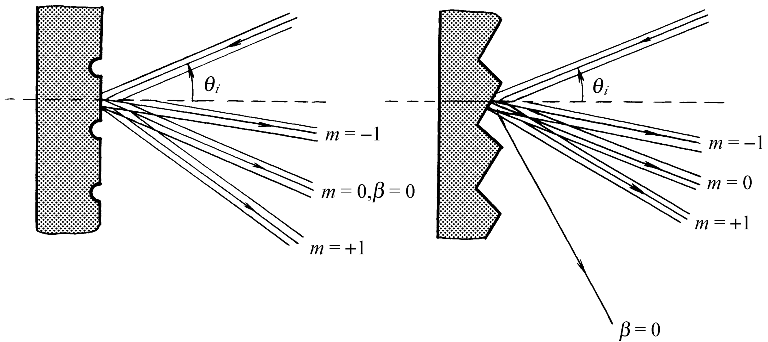
正弦振幅光栅　sinusoidal amplitude grating　见“振幅光栅”。

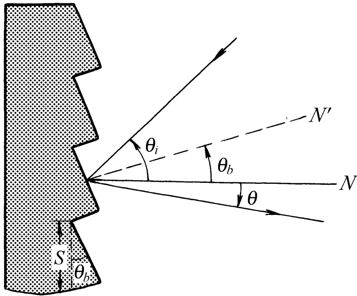
相位光栅　phase grating　屏函数的模为常数的衍射屏称为相位型的光栅,用全息方法制成的漂白光栅其屏函数为 $t(x,y)=\exp\left[\mathrm{i}\frac{m}{2}(px)\right]$,屏函数的相位按正弦形式变化的光栅称为正弦型相位光栅。

正弦相位光栅　sinusoidal phase grating　见“相位光栅”。

闪耀光栅　blazed grating　1888年罗兰指出,通过控制反射光栅的刻槽形状可改变各级主极大的相对光强分布。1910年伍德做出了第一个用于红外光的、有一定刻痕形状的光栅,称为闪耀光栅,亦称为定向光栅。如图所示。闪耀光栅所产生的衍射图中,各级主极大的位置不受刻痕形状的影响,而单缝衍射的中央主极大移至由刻痕所决定的反射光的方向,结果在反射光方向的光谱变强或称闪耀。对应的方向称为闪耀方向。按一般惯例,一级闪耀波长 λ_B 即为光栅的闪耀波长。

定向光栅　directional grating　见“闪耀光栅”。



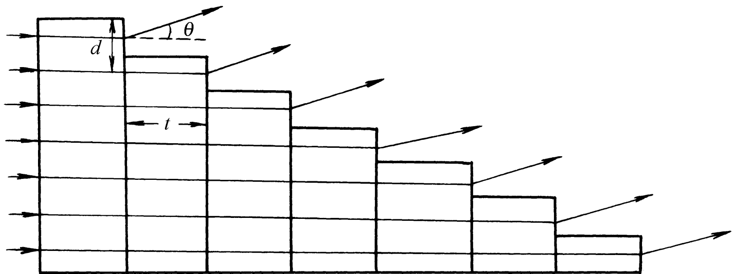


闪耀方向 blazed direction 见“闪耀光栅”。

闪耀波长 blazed wave length 见“闪耀光栅”。

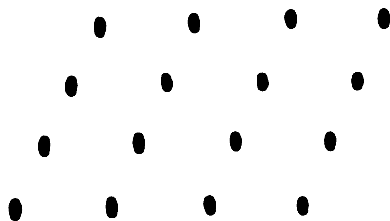
阶梯光栅 echelon grating 它是由迈克尔逊首先提出，后由威廉斯改进研制而成，是一种有高分辨率的色散元件，由排列得像阶梯一样的一堆厚度和折射率相同的透明玻璃或石英板组成。板的厚度 t 一般为 1～2cm，阶梯高度 d 为 0.1cm，这种光栅也分为反射式和透射式两种。当平行光入射透射式阶梯光栅时，其光栅方程为 $t(n-1)+d\theta=k\lambda$，对反射式阶梯光栅其光栅方程为 $2t-d\theta=k\lambda$，式中 θ 为衍射线与阶梯光栅法线的夹角。

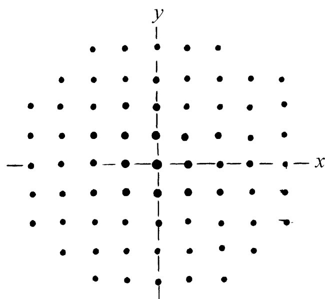
阶梯光栅可使高级次的光谱获得最大的相对强度，因而能有高分辨本领和强光谱。由于阶梯光栅中 N 小 k 大，光谱级次高，决定了只适合于研究光谱的精细结构，分辨本领与波段无关，因制造相当困难，没有被广泛应用。



二维光栅 two-dimensional grating 屏函数为二维周期函数，通常是由两个平面光栅合在一起彼此相交一定的角度，这样就组成了二维光栅。如果交角为 90°，两组刻线互相正交，这种光栅称为正交光栅。图(a)为二维光栅的构造示意图。当平行光垂直入射在正交光栅上时，其光强分布为 $I=I_0\left[\dfrac{\sin(N_1 v_x)}{\sin v_x}\right]^2\cdot$

$\left[\frac{\sin(N_2 v_y)}{\sin(v_y)}\right]^2$,式中 $v_x=\frac{\pi}{\lambda}d_x\sin\alpha$, $v_y=\frac{\pi}{\lambda}\cdot d_y\sin\beta$。α,β 是衍射的方向,$d_x$, d_y 分别为 x 方向和 y 方向的光栅常数。当 $\alpha=0$, $\beta=0$ 对应中心亮斑,满足 $v_x=n_1\pi$, $v_y=n_2\pi$(n_1, n_2 为整数)时,对应各级亮斑,衍射图样如图(b)所示。


(a)



(b)

正交光栅 orthogonal grating　见“二维光栅”。

三维光栅 three-dimensional grating　屏函数是三维空间的周期函数,劳厄在 1913 年提出晶体内原子是有规则排列的,可当作 X 射线的三维光栅,也称为晶体光栅。后由弗莱特里希和奈平实验成功,即证明了 X 射线是一种电磁波亦证明了晶体内部原子是等间隔排列的。现已成为研究晶体结构和测量 X 波长的有力工具。

当入射 X 射线通过晶体时,使晶体原子内的电子产生受迫振动成为次波的振源,如果把晶体看做许多平行的晶面堆积而成,这些次波合成的结果将在某一方向产生最大的干涉强度,产生相长干涉的条件必须满足劳厄方程或布拉格方程。劳厄方程为
$$\begin{cases} d_1(\alpha_2-\alpha_1)=h_1\lambda \\ d_2(\beta_2-\beta_1)=h_2\lambda, \\ d_3(\gamma_2-\gamma_1)=h_3\lambda \end{cases}$$
式中 d_1, d_2, d_3 为晶体点阵常数,入射线的方向余弦为 α_1, β_1, γ_1,衍射线的方向余弦为 α_2, β_2, γ_2, h_1, h_2, h_3 为整数。满足劳厄方程的衍射图称为劳厄图。布拉格方程为 $2d\sin\theta=m\lambda$,式中 d 为相邻两晶面的间距,θ 是入射线与晶面的夹角,m 为整数。

劳厄方程 Laue equation　见“三维光栅”。

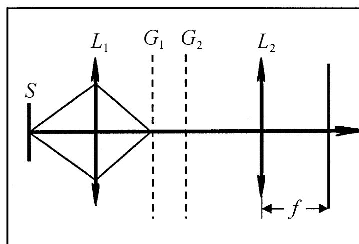
劳厄图 Laue pattern　见“三维光栅”。

布拉格方程 Bragg equation　见“三维光栅”。

晶体光栅 crystal grating　见“三维光栅”。

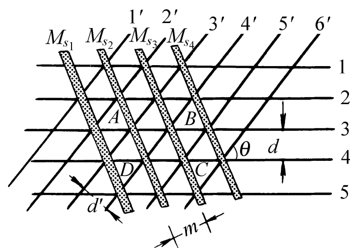
泰保效应 Talbot effect　1836 年泰保发现的一种效应,当用平行光通过具有周期性透射率函数的图片时,发现在其后距离满足:$Z=\frac{2nd^2}{\lambda}$, $n=0,\pm1,\pm2,\cdots$ 处,衍射场强度分布与原物强度分布相同,式中 d 为光栅的周期,λ 为光源波长。这种不用透镜可对周期物体成像的方法称为泰保效应,即所谓“自成像”(self-imaging)或称“傅里叶像”,在光学、电子衍射与电子显微镜等方面得到广泛的应用。泰保效应产生的物理原因在于各衍射分量之间再次发生干涉而引起的成像关系,因此需用相干光照明。

劳效应 Lau effect　它是由劳(E. Lau)于 1948 年发现的,两个相同的粗光栅用扩展白光



光源照明，当两光栅间距满足：$Z_T=\frac{nd^2}{2\lambda}$，$n=1,2,3\cdots$时，在无限远处将观察到彩色条纹，式中 d 为光栅的周期，λ 为平均波长，n 为整数。可应用于观察相位物体，并可应用于剪切干涉仪和傅里叶光谱仪中。

叠栅条纹 Moiré fringe 光栅常数完全相同或相近的透明光栅重叠在一起，并令它们的刻痕间有一定的夹角，在光的照明下，可观察到一组明暗相间的条纹，我们称它为叠栅条纹。叠栅条纹的间距为 $m=\frac{d}{2\sin(\theta/2)}$，式中 d 为光栅常数。叠栅计量技术有了很大的发展，已应用于精密仪器和精密机床中。



六、偏　振
Polarization

偏振 polarization 波有纵波横波之分，纵波对传播方向是对称的，横波则不对称。即使由许多横波组成的波列，环绕着传播方向的振动也可能具有不对称性，具有这种不对称性称为偏振。

自然光 natural light 常见的可见光源向某一方向发出的光是由许多互不相干的波列组成。这些波列的振动在垂直于传播方向的平面内作无规则的取向。各种取向的概率是相同的。所以在一定的时间内环绕着传播方向的振动具有对称性，这样的光称为自然光。作图时如用一箭头代表光的传播方向，用二个互不相干、方向相互垂直的振动代表自然光的电振动，在效果上可用点表示垂直于纸面的振动，用直线表示在纸平面内的振动，如图所示。



偏振光 polarized light 具有对传播方向不对称性的光称偏振光。见“偏振”。

平面偏振光 plane polarized light 电矢量的振动在整个传播空间限于一个平面内的称平面偏振光。如在一定点观察，此电矢量的方向不变，大小在变化，其端点在一条直线上振动，故平面偏振光也可称为直线偏振光。

直线偏振光 linear polarized light 见“平面偏振光”。

圆偏振光 circularly polarized light 在一定点看去电矢量方向一直在变，其端点在垂直于传播方向的平面上的轨迹为圆（大小不变）或椭圆（大小也变）。观察者向波传播来的方向望去，电矢量作顺时针转动的为右旋圆偏振光或右旋椭圆偏振光。作逆时针转动的为左旋圆偏振光或左旋椭圆偏振光。

右旋圆偏振光 right-hand circularly polarized light 见“圆偏振光”。

左旋圆偏振光 left-hand circularly polarized light 见“圆偏振光”。

椭圆偏振光 elliptically polarized light 见“圆偏振光”。

右旋椭圆偏振光 right-hand elliptically polarized light 见“圆偏振光”。

左旋椭圆偏振光 left-hand elliptically polarized light 见“圆偏振光”。

部分偏振光 partially polarized light 电矢量在某一方向最强，在其他方向较弱的偏振光称为部分偏振光。见“偏振光”。

偏振度 percentage polarization 电矢量在某一方向最强时测定其光强为 I_{max}，最弱的方向为 I_{min}，则

$$偏振度=\frac{I_{max}-I_{min}}{I_{max}+I_{min}}\times 100$$

振动平面 oscillating plane 光传播方向和电矢量振动方向组成的平面。

偏振面 polarized plane 通过传播方向并与振动平面垂直的平面。

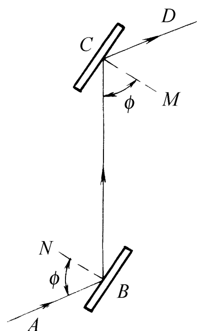
起偏器 polarizer 输入是自然光，输出是某

种形式偏振光的器件。可以利用反射、折射、双折射或二向色性(即选择吸收)等方法实现。

检偏器 analyzer　检查光是否为某种形式偏振光的器件。通常产生偏振光的器件反过来也可检查偏振光，也可作检偏器用。

马吕斯实验 Malus experiment　当自然光以特定入射角射在普通玻璃的光滑平面上时，其反射光为平面偏振光。虽然用肉眼观察不出，但这可用第二块玻璃加以证实。

自然光 AB 以 ϕ 角(约 57°)入射在第一块玻璃 B 点发生反射，反射光再在与第一块玻璃平行的第二块玻璃的 C 点上反射。设把上面一块玻璃以 BC 为轴旋转，并保持入射角不变，便可发现反射光 CD 的光强渐渐减小，当转到 90°时，光强减小到零。产生偏振光的第一块玻璃可称为起偏器。第二块检查是否为偏振光的为检偏器。若不是以 57°角入射，则二次反射后的光仍有最大和最小，但最小时强度不为零。



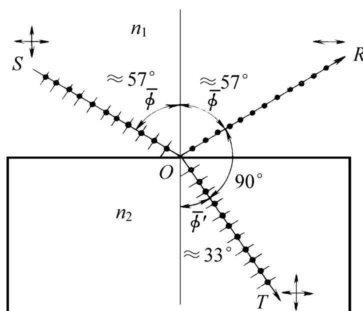
布儒斯特定律 Brewster law　自然光以入射角 ϕ 射在介质上时产生反射光和折射光。布儒斯特发现当反射光与折射光夹角为 90°时，反射光成为平面偏振光，振动方向垂直于纸面，而折射光为部分偏振光。

从折射定律可知：

$$n_1 \sin\phi = n_2 \sin(90° - \phi) = n_2 \cos\phi$$

$$\tan\phi = \frac{n_2}{n_1},$$

此方程为布儒斯特定律。其中 n_1 为第一种介质的折射率，n_2 为第二种介质的折射率。通常



n_1 为空气，故 $\tan\phi = n_2$。

见“自然光”。

布儒斯特角 Brewster angle　布儒斯特定律中的角度 ϕ 称布儒斯特角，对玻璃或其他介质都存在这样一个特定的角度 ϕ。见“布儒斯特定律”。

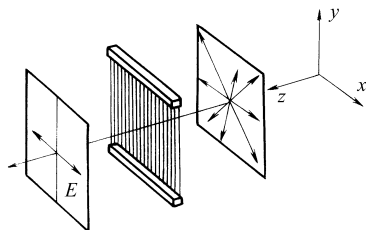
起偏振角 polarizing angle 布儒斯特角也称起偏振角。见“布儒斯特角”。

玻片堆 a pile of plates　玻片堆是通过折射产生偏振光的器件。以偏振角入射在玻片上的光，反射光为平面偏振光，折射光为部分偏振光。但如入射在一叠平行的玻璃片堆上，因为有许多玻璃组成的反射面，每个反射面反射的光都是同一平面上的偏振光。而透出的光则因逐步失去垂直振动的光而接近于平面偏振光，故通常可用玻片堆产生经折射而透射出近似平面偏振光。

马吕斯定律 Malus law　是说明直线偏振光经检偏器透出的光强 I_1 随检偏器和起偏器透射面夹角 θ 而变化的定律。这里透射面是偏振光的振动面，起偏器和检偏器透出的是平面偏振光。如 I_0 为直线偏振光入射在检偏器上的光强，I_1 是检偏器透出的光强，则 $I_1 = I_0 \cos^2\theta$，此即马吕斯定律。

线栅起偏器 wire grid polarizer　若有一非偏振的电磁波从右面射在平行导线组成的线栅上，可以把电场分解为平行和垂直于导线的二个正交分量，电场 y 分量在导线长度方向上驱动电子产生电流，电子又和导线晶格原子碰撞交给它们能量从而使导线变热，能量因此由

电场传给线栅。所以电场的 y 分量很少透过线栅或根本不透过。故通过线栅的只有 x 方向的分量，这就是线栅起偏器。可以用普通导线作为线栅起偏器，用微波来加以证实。



光栅起偏器 grating polarizer 根据线栅起偏器的原理，现已制成每毫米 2160 条线的线栅，是用蒸发金属原子到塑料复制光栅上制成的，光栅间距小于一个光波波长。见“线栅起偏器”。

二向色性 dichroism 有的矿物在白光照射下，从某一方向看去透射光是一种颜色，从另一方向看去则是别的颜色，此即二向色性。这些矿物或有机化合物有吸收自然光的两种垂直振动之一的本领，可作起偏器用。但此种物体往往也要吸收一部分透射光，故出来的光是有颜色的，这种晶体即二向色晶体。

二向色晶体 dichroic crystals 见“二向色性”。

偏振片 polaroid 在透明薄片上按一定的人工方法制成的二向色晶体薄膜，把薄膜拉伸使晶体沿膜的拉伸方向排列，这样就能吸收一个方向振动的光，使另一方向的光透过从而产生偏振光。

薄膜干涉偏振器 film interference polarizer 类似玻片堆起偏器，不同的是在玻片上镀膜，从光学原理来说总能找到一个入射角对 1/4 波长有效厚度基底仅反射垂直于纸面的偏振光，这样所用的玻片要比玻片堆少得多且性能相同。此外用多层镀膜法，在两直角棱镜间交替镀高折射率和低折射率的膜，只要严格地控制膜的层数、厚度，并使之与玻璃的折射率相匹配，就可得到反射光是直线偏振光而透射光也是直线偏振光的所谓偏振分光镜。见“玻片堆”。

偏振分光镜 polarizing spectroscope 见“薄膜干涉偏振器”。

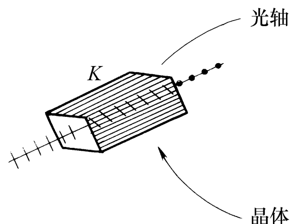
双折射 double refraction 有的晶体对一束入射光会产生二束折射光，这种现象称为双折射。这二束折射光都是平面偏振光。所以双折射晶体常用作产生偏振光的器件。

双折射晶体 birefringent crystals 能产生双折射的晶体。见“双折射”。

寻常光线 ordinary ray 双折射现象中，一条光线是遵守折射定律的称 O 光，即寻常光线。见“双折射”。

非常光线 extraordinary ray 双折射晶体中，另一条折射光线可以不在入射面内，且入射角的正弦与折射角的正弦之比不是常数，随入射角而变，不服从折射定律。这条光线称 E 光，即非常光线。

光轴 optic axis 双折射晶体中有一个固定的方向，沿着这方向不发生双折射，这个固定的方向称为光轴。



单轴晶体 uniaxial crystals 晶体如石英（也称水晶，quartz）、方解石、冰、硝酸钠晶体等只有一个光轴，称单轴晶体。见“光轴”。

双轴晶体 biaxial crystals 晶体如云母（Mica）有两个光轴称双轴晶体。见“光轴”。

正单轴晶体 positive uniaxial crystals 如石英，O 光的传播速度大于随方向而变的 E 光的传播速度，只有在光轴方向，两种光的传播速度才相等。见“寻常光线”与“非常光线”。

负单轴晶体 negative uniaxial crystals 这种晶体中随方向而变的 E 光速度总是大于 O 光的传播速度，只有在光轴方向两者的速度才相同，如方解石（calcite）。见“寻常光线”与“非常光线”。

主平面 principal plane 双折射晶体中寻常光线的主平面是晶体中经过光轴和寻常光线的平面，而非常光线的主平面是在晶体中经过光轴和非常光线的平面。通常这两个平面不一定重合，但大多数情况下其夹角很小。

主截面 principal section 通过光轴并与晶体的一个晶面正交的平面称主截面。晶体中的每一点有三个主截面。在入射面是主截面的情况下，O 光的主平面和 E 光的主平面相重合，这样可使双折射现象的研究大为简化，而且 O 光光矢量的振动方向垂直于主截面，E 光的振动方向在主截面内。

折射率椭球 refraction index ellipsoid 是用光的电磁理论来说明双折射现象，从电磁理论可知电场在介质中产生电位移矢量 $\boldsymbol{D}$，$\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$，$\varepsilon$ 是个标量。不过在双折射晶体中 $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 的方向通常是不同的，只有在三个特殊的互相垂直的方向上是相同的，用 x、y、z 表示这三个方向则

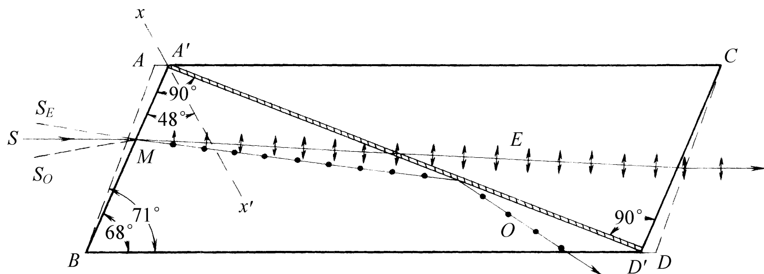
$$\boldsymbol{D}_x=\varepsilon_x\boldsymbol{E}_x,\ \boldsymbol{D}_y=\varepsilon_y\boldsymbol{E}_y,\ \boldsymbol{D}_z=\varepsilon_z\boldsymbol{E}_z。$$

在光频范围内 $\varepsilon=n^2$，故 $\varepsilon_x=n_x^2$，$\varepsilon_y=n_y^2$，$\varepsilon_z=n_z^2$ 光在晶体中的传播可用一椭球表示，方程为

$$\frac{x^2}{n_x^2}+\frac{y^2}{n_y^2}+\frac{z^2}{n_z^2}=1$$

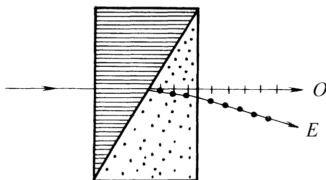
晶体内沿任何方向传播的光，其速度和振动方向都可以从这椭球得出。

尼科耳棱镜 Nicol prism 是用双折射晶体方解石制造的光学器件，用以产生或检查偏振光。原理是把自然光通过双折射晶体产生的两条折射光之一移去，射出的一条光就是平面偏振光。构造是把两块方解石沿一定方向切割，使在主截面上的角度从 71°变成 68°，并在 AD 上切开磨光，然后用加拿大树胶胶合起来，加拿大树胶的折射率介于 O 光和 E 光之间。所以 E 光可折射入树胶再射出，而 O 光则因入射角相当大被全部反射，这样射出的就是平面偏振光 E。但入射到棱镜上的光在超过一定角度时将有一些穿过，所以尼科耳棱镜不适合高度会聚或发散的光束。如图所示，xx' 是光轴方向，AD，$A'D'$ 是用加拿大树胶胶合处，从尼科耳棱镜端面看去，出射光的振动方向平行于 CD'。见“寻常光、非常光、主截面”。



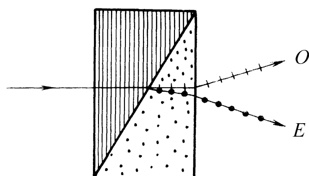
洛匈棱镜 Rochon prism 因为紫外光不能透过加拿大树胶，所以在紫外光时不能用尼科耳棱镜，为此可选用洛匈棱镜和渥拉斯顿棱镜。它们都是用以一定角度切开的水晶或方解石用甘油等黏结而成的。特点是可以产生两条振动面互相垂直、分得较开的平面偏振光。

洛匈棱镜中光垂直入射沿光轴前进，在到棱镜边界时发生双折射，第二块棱镜光轴垂直于纸面，这样射出的 O 光没有偏向，且无色差，E 光可在距棱镜较远处遮掉。



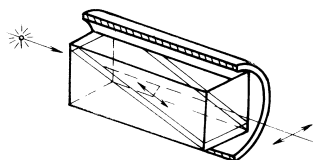
洛匈棱镜

渥拉斯顿棱镜 Wallaston prism　渥拉斯顿棱镜中光线垂直于镜面射入而垂直于光轴进行，然后到达光轴垂直于纸平面的第二块棱镜发生双折射，这两束光都有偏向，所以得到的是两束分得较开的有色光线。在研究偏振光强度时这种棱镜特别有用，因为振动方向互相垂直的两条光形成相邻的两个像，可以相比较。



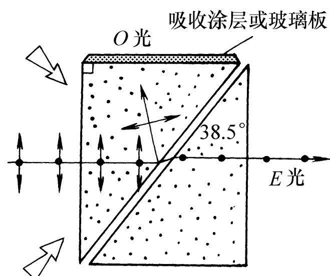
渥拉斯顿棱镜

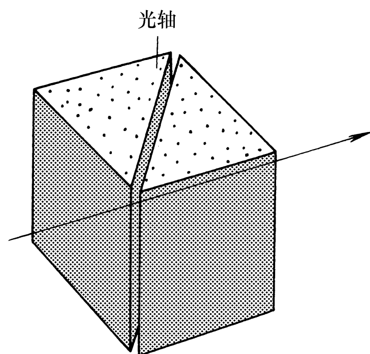
格兰-汤普森棱镜 Glan-Thompson prism　与格兰-傅科棱镜相似，格兰-汤普森棱镜是把两块方解石棱镜用甘油或其他矿物油黏结起来，且界面角度作适当改变，故视场角较大约30°。但因有界面胶存在，不能耐受很大功率。见“格兰-傅科棱镜”



标准格兰-汤普森棱镜起偏器

格兰-傅科棱镜 Glan-Foucault prism　格兰-傅科棱镜是用方解石制成的两个直角棱镜，光轴垂直于纸面，入射光垂直射到棱镜表面上，可以把电矢量分解成完全平行于光轴和完全垂直于光轴的两个分量，注意到方解石-空气界面的入射角为 θ。只要使 $n_e < \frac{1}{\sin\theta} < n_o$，O 光就被全内反射，E 光则能通过。因两块棱镜中是空气层，故能承受很高功率，这对使用功率强大的激光特别有用，但其视场角较小，约10°。





格兰-傅科棱镜

菲涅耳方程 Fresnel equations　当光通过两种透明介质分界面时，入射光分为反射光和折射光，其进行方向分别由反射定律和折射定律确定。但这两光束的相对振幅和振动取向则要用电磁理论来分析得出。把入射光分为振动平面平行于入射面的线偏振光（又称 P 分量）和振动面垂直于入射面的线偏振光（又称 S 分量），用电磁理论及折射定律可以导出下面四个公式：（i_1 为入射角，i_2 为折射角）

反射比

$$r_p = \frac{E'_{p_1}}{E_{p_1}} = \frac{\tan(i_1 - i_2)}{\tan(i_1 + i_2)} \quad (1)$$

透射比

$$t_p = \frac{E_{p_2}}{E_{p_1}} = \frac{2\sin i_2 \cos i_1}{\sin(i_1 + i_2)\cos(i_1 - i_2)} \quad (2)$$

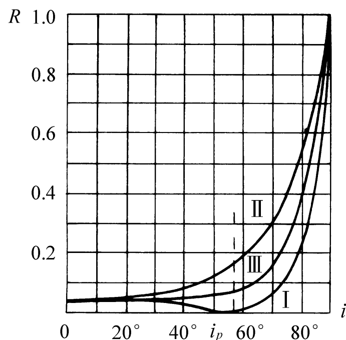
反射比

$$r_s = \frac{E_{s_1}'}{E_{s_1}} = -\frac{\sin(i_1 - i_2)}{\sin(i_1 + i_2)} \qquad (3)$$

透射比

$$t_s = \frac{E_{s_2}}{E_{s_1}} = \frac{2\sin i_2 \cos i_1}{\sin(i_1 + i_2)} \qquad (4)$$

E_{p_1}, E_{p_1}', E_{p_2}代表入射光、反射光、折射光平行于入射面的电矢量振幅。E_{s_1}, E_{s_1}', E_{s_2}代表入射光、反射光、折射光垂直于入射面的电矢量振幅。由菲涅耳方程可以求出在一定入射角下反射和透射的相对振幅,也可从振幅的平方求出强度。若以纵轴代表反射率 R(为强度比),横轴代表入射角 i_1,对于 $n=1.0$ 和 $n'\approx 1.5$ 的情况,由菲涅耳方程中的(1),(3)可分别得图的曲线Ⅰ和Ⅱ。其中Ⅰ代表平行于入射面的电矢量随入射角 i 而变的反射率。Ⅱ代表垂直于入射面的电矢量,Ⅲ代表平均值。图中可见在 i_p 处,Ⅰ的反射为零,得到的是垂直于入射面振动的全偏振光。



菲涅耳反射比 Fresnel reflectance 菲涅耳公式中的 r 称为菲涅耳反射比。见“菲涅耳方程”。

菲涅耳透射比 Fresnel transmittance 即菲涅耳公式中的 t。见“菲涅耳方程”。

半波损失 half wave loss 当入射光的入射角接近于零,且 $n_2 > n_1$,即从光疏介质射向光密介质时,从菲涅耳公式可以导出反射比 r_s 为负。在入射角为大角度的情况下,r_p、r_s 二者均为负,这相当于入射光和反射光之间相位差π,也可以说反射光多走了半个波长,亦称半波损失。

平行偏振器 parallel polarizers 把两个偏振器中的前面一个作为起偏器产生偏振光,后面一个作为检偏器检查光的偏振情况。可以看出,当此两个器件的透射平面偏振光的方向相互平行时,偏振光全部通过,相互垂直时则无光线透出。通常此两个偏振器用尼科尔棱镜组成,这也就是平行和正交的尼科耳棱镜。加上其他器件,此光学系统可用来鉴别各种偏振光,观察偏振光的干涉情况,鉴别各种晶体等,所以有很大用途。

正交偏振器 crossed polarizers 见“平行偏振器”。

偏振光的干涉 interference of polarized 当二束同频率且有固定相位差的偏振光相互叠加时,若其电矢量的振动方向相同,则在叠加区域出现强度不相加的干涉现象。如振动方向相互垂直则根据相位差的不同,从数学上可知,此二相互垂直振动的合成可以是圆、椭圆或直线,这就是圆偏振光、椭圆偏振光和直线偏振光。但人眼不能鉴别出来,必须用一些其他器件如检偏器,把它们的分量投影到同一个振动面上才能发生干涉,这是偏振光干涉的一种特殊情况。见“波片,检偏器,补偿器”。

平行偏振光的干涉 interference of parallel polarized light 正交的二个尼科耳棱镜,用平行光入射时通常没有光通过第二个尼科耳棱镜。如在其中放入一块光轴平行于表面的晶体薄板,则一般都有光从第二个尼科耳棱镜穿出。原因是光穿过晶体薄板产生 O 光和 E 光,在通过晶体薄板后二束光的相位差为 $\delta=\frac{2\pi}{\lambda}(n_o - n_e)l$,合成为圆或椭圆偏振光,有光通过第二个尼科耳棱镜。

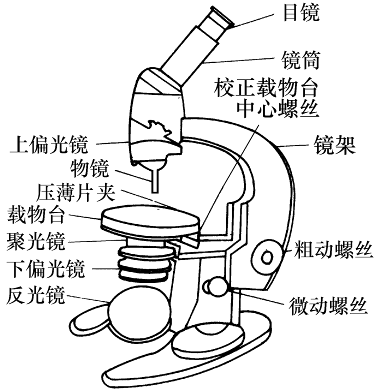
色偏振 chromatic polarization 正交的尼科耳棱镜系统中,如放入一块光轴平行于表面的晶体薄板,当入射光是白光时,则对不同波长的光折射率 n_o、n_e 是不一样的,所以 O 光、E 光的相位差也不一样,因此相长干涉与相消干

涉不会同时产生。因为不同的波长有不同程度的增强或减弱,透出的光呈彩色,这种现象为色偏振。如转动其中一个尼科耳棱镜,变成平行的尼科耳棱镜时,则呈现的颜色与正交系统不同,这二种颜色称为互补色。色偏振是鉴定双折射现象极灵敏的方法。

会聚偏振光的干涉 interference of convergent polarized light 当在正交的二个尼科耳棱镜中放入一块光轴与表面垂直的晶体平板,如仍用平行单色光入射则无光透出,观察不到偏振光的干涉。这是因为沿光轴方向进行的 O 光、E 光速度是相同的,所以它们间没有相位差。但是在晶体平板前放一块会聚透镜,则除了在透镜中心的光仍是沿光轴进行外,其他的光都是倾斜入射的,因而发生双折射,且 O 光、E 光之间有一定的相位差,这时就产生会聚偏振光的干涉。

偏光显微镜 polarizing microscope 是用偏振光观察双折射等各向异性物体的显微镜。主要是在显微镜的聚光镜前加入一个起偏器,在显微镜物镜后加一检偏器。此二者均可在自身的平面内转动。此外,在物镜与检偏器之间还可加入波片或补偿器,由于偏振光的干涉可以观察到各种干涉图样,由此可以研究晶体的性质。

如图可以看出与普通显微镜相比较只是多了一个下偏光镜(即起偏器),上偏光镜(即检偏器),其他结构都和普通显微镜相同。见“偏振光的干涉”,光路可见“显微镜”。



偏光显微镜

波片 wave plate 用一块表面平行于光轴的平行晶片制成,可以产生和检查各种偏振光。原理是使在一定厚度的双折射晶体中 O 光和 E 光因折射率的不同产生固定的相位差,也可以说相位延迟,所以称推迟器(Retarder)。此相位差表现在波长上差一个确定的波长,故也称为波片。如晶体厚度为 l, n_o、n_e 为 O 光和 E 光的折射率,则 O 光和 E 光的相位差为 $\delta=\frac{2\pi}{\lambda_0}(n_o-n_e)l$, λ_0是光在真空中的波长。

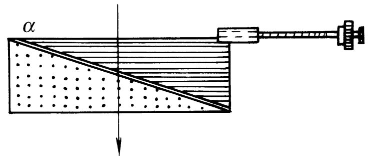
全波片 whole wave plate 如 O 光和 E 光的相位差 $\delta=2k\pi$, k 为正整数,则从晶体波片中穿出的光仍是平面偏振光,且振动方向与原入射方向相同,此波片即称为全波片。

半波片 half wave plates O 光和 E 光的相位差为 $\delta=(2k+1)\cdot\pi$, k 为正整数时为半波片,当入射光为平面偏振光时,从晶体波片穿出的光仍为平面偏振光,但振动方向转了 2θ 角(θ 为入射光的振动面与晶体主截面之间的夹角)。

四分之一波片 quarter-wave plates O 光和 E 光的相位差 $\delta=(2k+1)\cdot\frac{\pi}{2}$, k 为正整数,则从晶体波片出射的光为圆偏振光或椭圆偏振光,此波片称为四分之一波片。

补偿器 compensator 因为波片中 O 光和 E 光的相位差是固定的,但用来分析和产生椭圆偏振光却需要相位差可以变化的器件,这种器件就是补偿器。

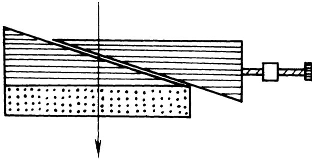
巴比涅补偿器 Babinet compensator 这种补偿器由二个楔形石英组成,其光轴相互垂直,如图。显然光在中央通过时因为经过二个楔形的路程相等,故不发生相位差,但在其他地方上楔和下楔的路程不同,所以发生相位差。通过补偿器的不同各点产生不同的相位



巴比涅补偿器

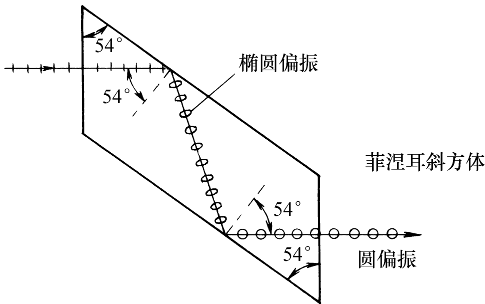
差。

索来尔补偿器 Soleil compensator 为了产生相同的相位差可使用索来尔补偿器，构造如图：上楔和下楔的光轴互相平行，且平行其表面。下面再放一块光轴垂直于纸面的晶体平板。随着移动微动螺旋，二楔的厚度发生变化，相位差也随之而变，但整个补偿器的相位差各处都是相同的。



索来尔补偿器

菲涅耳斜方体 Fresnel rhombus 是产生圆偏振光或椭圆偏振光的器件。入射在斜方体上的是平面偏振光，其振动面和入射面成 45°角。由于全内反射，在平行于入射面和垂直于入射面的电矢量彼此产生相位差，使光束全内反射二次后则相位差为 90°，故得到圆偏振光。如入射面和振动面的角度不是 45°，得到的是椭圆偏振光。



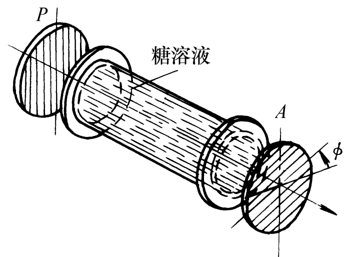
旋光性 optical activity 某些晶体如石英，当平面偏振光沿光轴方向传播时，出射光的电矢量振动面相对于入射光的振动面旋转了一个角度，这种现象称为旋光性。

左旋 left-handed rotation 迎着光看去入射平面偏振光的振动面沿逆时针方向旋转的称左旋，沿顺时针方向则称右旋。见“旋光性”。

右旋 right-handed rotation 见“左旋”。

旋光率 specific rotation 光的电矢量振动面旋转角度 ϕ 和所经过的路程长度 l 成正比，即 $\Delta\phi=\alpha l$，但在溶液中还和溶液浓度 c 有关，此时 $\Delta\varphi=\alpha lc$，α 为比例系数称旋光率。见“旋光性”。

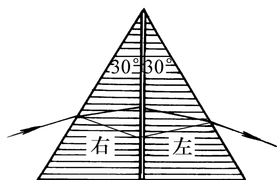
量糖计 saccharimeter 一种用测量偏振面旋转的角度 ϕ 来测定糖溶液中糖浓度的仪器，结构如图。在一对偏振器之间加入一玻璃管，两端面为两块平行平面，管内充满糖溶液（旋光液体）。由糖溶液放入前后检偏器消光位置对应的角度变化来测定线偏振光振动面转过的角度，从而计算出糖溶液的浓度。见“旋光率”。



旋光色散 rotatory dispersion 一定长度的旋光物质中不同波长的光旋转的角度不同，称旋光色散。见“旋光性”。

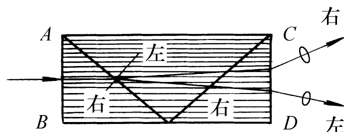
旋光理论 theory of optical activity 菲涅耳提出沿光轴方向传播的平面偏振光可以看做由二个沿相反方向旋转的等频率的圆偏振光组成，晶体的旋光性是由于在光轴方向相反旋转的二个圆偏振光有不同的传播速度而造成。

考纽棱镜 Cornu prism 用石英作色散棱镜时,光通过棱镜由于旋光性会发生双折射,使单谱线变成双谱线。考纽将左旋石英和右旋石英制成折射角为30°的棱镜然后胶合起来如图。这样第一个棱镜产生的双折射恰为第二个棱镜所抵消。



菲涅耳多棱镜 Fresnel multiple prism 菲涅耳以此棱镜来验证他提出的旋光理论。平面偏振光射在复合棱镜上,此棱镜是由光轴平行于底面的二个右旋石英直角棱镜和一个直角等腰的左旋石英棱镜胶合而成的,透出的是左旋和右旋圆偏振光。

平面偏振光在第一棱镜中不发生折射。但沿光轴方向传播的不同方向旋转的圆偏振光以不同速度传播,且 $v_R > v_L$。在第二棱镜因为是左旋 $v_L > v_R$,所以在1,2棱交界面上左旋光速度由小变大,折射光远离法线。相反右旋光由大变小,折射光近法线。结果在第二棱镜二条光线分开,通过第三棱镜出射的光分得更开,经验证这是左旋和右旋圆偏振光。



光弹效应 photoelastic effect 某些各向同性的透明介质,在加上机械应力后具有双折射的性质,这又称机械双折射、应力双折射或光弹效应等。其有效光轴在应力方向上,且引起的双折射与应力成正比。光弹效应为光学加工带来很多麻烦,玻璃退火不足或安装不好都会在玻璃中产生应力,从而产生双折射,影响成像质量。不过这效应却可用来研究机械结构内部应力分布。把待分析的机械结构用透明材料做成模型,并按实际情况施力,再把此模型放在正交起偏和检偏系统中即可观察到干涉条纹,由此来分析应力情况。

电光效应 electro-optic effect 分二种,克尔效应(Kerr effect)和泡克耳斯效应(Pockels effect)。克尔发现某些各向同性透明介质在外加电场下具有双折射性质,设 $n_{/\!/}$ 和 $n_{\perp}$ 分别为介质在外加电场后平行和垂直电场方向的折射率,折射率差 $\Delta n = n_{/\!/} - n_{\perp}$,$\Delta n = \lambda_0 k E^2$,$\lambda_0$ 是光在真空中的波长,E 是外加电场强度,k 是克尔常数(Kerr constant)。因 Δn 不是与 E 成正比而是与 E^2 成正比,所以克尔效应是一种非线性效应,常称平方电光效应(quadratic electro-optic effect)。当光通过这种加上调制电场的透明介质时,介质中平行和垂直电场方向的光在经过一定长度后发生相位差,所以克尔效应起可变波片的作用。其特点是响应快,可达 10^{10}Hz,因此可作高速摄影中的快门,对光强进行调制,或作斩波器测光速等。见"波片"。

克尔效应 Kerr effect 见"电光效应"。

泡克耳斯效应 Pockels effect 见"电光效应"。

克尔常数 Kerr constant 见"电光效应"。

平方电光效应 quadratic electro-optic effect 见"电光效应"。

克尔盒 Kerr cell 装有克尔效应中所用的透明介质的盒。见"克尔效应"。

半波电压 half wave voltage 使用克尔盒使其成为相当于半波片所需要的电压。见"半波片"。

泡克耳斯效应 Pockels effect 泡克耳斯发现有的晶体在加上电场后也能产生双折射,可以起可变波片的作用。但这种效应是线性的,即感应双折射与所加的电场一次方成正比。比例常数 γ 称电光常数(electro-optic constant),这种效应也称线性电光效应(linear electro-optic effect)。常用的合适晶体有ADP及KDP等。Pockels效应的优点是在相同的通光孔径下操作电压只有Kerr效应的一半,响应时间也很快。

泡克耳斯盒 Pockels cells 装有产生泡克耳斯效应晶体的盒。见"泡克耳斯效应"。

磁光效应 magneto-optical effect 法拉第(Faraday)发现在固体、液体、气体中传播的光，在光的传播方向上加上强磁场后通过它们光束的偏振面会发生旋转，称法拉第效应。旋转角度用 θ 表示，在光传播方向上的磁场用 H 表示，则 $\theta = VLH$，V 是常数称韦尔代(Verdet)常数，L 是材料路程长，法拉第效应可用来调制光强。

佛克脱效应 Voigt effect 在垂直于入射光束传播方向加一个恒定磁场，透明介质上会发生双折射。佛克脱效应发生于蒸气中，科顿-穆顿效应发生于液体中，加上磁场发生的双折射也称磁致双折射(magnetic double refraction)。

科顿-穆顿效应 Cotton-Mouton effect 见“佛克脱效应”。

塞曼效应 Zeeman effect 是一种磁光效应。把钠焰放在强磁铁的二极间，二条钠的光谱线都变宽，沿磁场方向分裂成二条线，且是圆偏振光，垂直于磁场方向分裂成三条线且是直线偏振光。如用分辨本领较高的光谱仪器从磁场正交方向来观察，发现另一些光谱线分裂成四条、五条甚至更多条线，这种现象称反常塞曼效应，经典理论只能解释塞曼效应，而量子理论完全能说明反常塞曼效应。

斯托克斯参量 Stokes parameters 是光学偏振态的数学表示。斯托克斯引入四个量作为表示偏振态的参量，即：

$$\boldsymbol{S}_0 = \langle |E_x|^2 \rangle + \langle |E_y|^2 \rangle$$

$$\boldsymbol{S}_1 = \langle |E_x|^2 \rangle - \langle |E_y|^2 \rangle$$

$$\boldsymbol{S}_2 = \langle 2E_xE_y\cos\delta \rangle$$

$$\boldsymbol{S}_3 = \langle 2E_xE_y\sin\delta \rangle$$

其中 E_x，E_y 是光的电矢量 $\boldsymbol{E}$ 在 x、y 方向上的振幅，δ 是二者的相位差。这四个参量可以表示自然光及各种偏振光。一个给定的斯托克斯参量可看做一个矢量。

琼斯矢量 Jones vectors 同斯托克斯参量不一样，琼斯矢量只适用于相干光及用于表示偏振光的情况。写成列矢量形式的琼斯矢量为

$$\boldsymbol{E} = \begin{bmatrix} E_x(t) \\ E_y(t) \end{bmatrix}。$$

琼斯矩阵 Jones matrices 偏振光经过偏振器件后，出射光的偏振态会发生变化。设入射光的偏振态为 $\boldsymbol{E}_1 = \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$，出射光为 $\boldsymbol{E}_2 = \begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix}$。则偏振器件的线性变换作用可以一个二行二列的矩阵表示，即：

$$\begin{bmatrix} A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix}$$

称矩阵 $\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{bmatrix}$ 为该偏振器件的琼斯矩阵。

密勒矩阵 Mueller matrices 斯托克斯矢量通过偏振元件的变换，可用 4×4 的矩阵表示。设入射光的斯托克斯矢量为 $\boldsymbol{E}_1$，偏振元件的密勒矩阵为 $\boldsymbol{M}$，则出射的偏振光为 $\boldsymbol{E}_2$，$\boldsymbol{E}_2 = \boldsymbol{ME}_1$。

散射引起的偏振 polarization by scattering 用检偏器观察散射光时，不论是分子散射或是微小质点的散射都可以发现是部分偏振光。在特定的条件下可以观察到平面偏振光。使自然光通过散射变成偏振光的原因可解释如下：当光通过偏振物质时，物质原子的电偶极矩在光波的电磁场作用下受迫振动，振动方向与入射光的电场振动方向一致，因此便向外辐射电磁波。根据电偶极子辐射，电偶极子只是在其他方向上辐射电磁波，而在偶极子的轴向上不辐射电磁波。而自然光可以看做由相互垂直的非相干的二个偏振光所组成。这样可知在沿自然光方向看去时仍是自然光，但观察方向垂直于主光束时则是平面偏振光，其他方向上则是部分偏振光。此解释只有在散射的质点比波长小时才是正确的。

七、散射和吸收
Scattering and Absorption

散射 scattering 除了反射和折射外，若光遇到不均匀介质，其颗粒大小与光波长可以比拟时，这时光就成球形散开，此时就不说是反射而是说散射，因这时已不能用反射定律了，

质点无规则分布引起的散射称廷德尔散射(Tyndall scattering)。在乳状液,胶体溶液等都有这种现象。通过研究光的散射可以了解物质结构。

廷德尔散射 Tyndall scattering 见“散射”。

分子散射 molecular scattering 有时表面上看来是纯净的介质中亦能观察到散射光,如大气中气体分子散射太阳光,使天空呈蔚蓝色。

瑞利散射 Rayleigh scattering 线度小于波长的物体引起光散射所依据的定律是瑞利所研究得到的。瑞利发现散射光强正比于驱动频率的四次方,与波长的四次方成反比,即 $I\propto\nu^4\propto\frac{1}{\lambda^4}$,也称瑞利定律。

米氏散射 Mie scattering 米氏发表了任何尺寸均匀球形粒子散射问题的严格解,具有极大的实用价值,可以研究雾、云、日冕、胶体和金属悬浮液的散射等。

拉曼散射 Raman scattering 散射光中除有与入射光频率相同的光谱线外,有时还可以观察到 $\nu_0\pm\nu_1$, $\nu_0\pm\nu_2$ 等频率发生变化的散射光谱线,这种现象称为拉曼散射,拉曼散射用来研究分子结构,已成为分子光谱学的重要组成部分。

拉曼效应 Raman effect 拉曼效应也就是拉曼散射。见“拉曼散射”。

布里渊散射 Brillouin scattering 布里渊推导出一个计算在物质中散射光频率的公式,ν_s 代表散射光的频率,ν_0 代表入射光频率,则 $\nu_s=\nu_0\pm\nu_p$,

$$\nu_p=\frac{2v}{c}\nu_0\sin\frac{\theta}{2}。$$

ν_p 代表物质内产生声波的频率,v 代表这种声波传播的速度,c 为光速,n 为物质的折射率,θ 表示散射光传播方向与入射光的夹角。产生布里渊散射的原因是物质内存在着微弱的声波,声波在物质传播过程中产生密度起伏,而这种密度起伏是运动着的,根据多普勒(Doppler)原理,散射光的频率将发生多普勒位移。$\nu_0-\nu_s$ 称布里渊散射位移。

受激布里渊散射 stimulated Brillouin scattering 受激布里渊散射主要是由于入射光功率很高,由光波产生的电磁伸缩效应在物质内激起超声波,入射光受超声波散射而产生的。散射光具有发散角小、线宽窄等受激发射的特性。也可以把这种受激散射过程看做光子场与声子场之间的相干散射过程。应用上可以通过研究材料的声学特性和弹性力学特性。

声子散射 phonon scattering 声子散射即受激布里渊散射。见“受激布里渊散射”。

受激拉曼散射 stimulated Raman scattering 高强度的激光和物质分子发生强烈的相互作用,使散射过程具有受激发射的性质,这种散射光是拉曼散射光,所以这一种非线性光学效应称受激拉曼散射。受激拉曼散射表现出阈值特性,像激光器一样只有适当的泵功率才能产生。其次得到的谱线宽度比较狭,再者散射光在各方向上并不是均匀分布的,而是在激发光的方向上强度最强,具有定向辐射性质。见“拉曼散射”。

一般吸收 general absorption 也称普遍吸收。除真空外,所有介质对任何波长的电磁波都只是在一定范围内的透明。如石英对可见光几乎是完全透明的,但对某些红外光却是不透明的。对光吸收很少并在一定的波段内都减弱同样强度的称为一般吸收。

选择吸收 selective absorption 一种物质对某些波长范围内的光呈现强烈的吸收称为选择吸收。任何介质对光的吸收都是由一般吸收和选择吸收组成的。物质因选择吸收而显示颜色。见“一般吸收”。

朗伯定律 Lambert law 描述物质吸收的规律。朗伯指出:当平行光通过厚度为 x 的均匀介质后,光强减弱为 $I=I_0e^{-kx}$, k 为吸收系数,I_0 为 $x=0$ 时的光强。上式为朗伯定律的数学表示式。

比尔定律 Beer law 描述溶液中光吸收的规律,溶液中吸收系数 k 与溶液浓度 c 成正比,$k=\alpha c$, α 为与浓度无关的常数,只与吸收物质分子特性有关。此时光强减弱为 $I=I_0e^{-\alpha cx}$为比尔定律的数学表示式。比尔定律只有在物质分子吸收本领不受邻近分子影响才是正确的。当浓度很大分子相互影响不可忽略时,此时比尔定律不成立。见“朗伯定

律”。

吸收光谱 absorption spectrum 令具有连续光谱的光(白光)通过吸收介质后再经过光谱仪,便可看到某些波段的光或某些波长的光被吸收而消失形成吸收光谱。同一介质其发射光谱与吸收光谱有相当严格的对应关系,发射光谱的亮线与吸收光谱的暗线具有一一对应关系。物质本身发射哪些波长的光,它就强烈吸收哪些波长的光。

共振辐射 resonance radiation 低压气体中原子被光子碰撞后,原子吸收光子而发生激发,这种激发原子能够在无规则分布的方向上,重新发射一个同一频率的光子,这一过程称共振辐射。

荧光 fluorescence 有些气体、液体、固体在受光照射后,其受激的原子发射能量比原来入射光子能量为低的光子,回到另外一个中间态。如果这个过程发生很快(约 10^{-7}秒),则称为荧光。如水溶液从白光中吸收蓝色部分,放射出来的荧光是绿色的。有些固体被照射后还会继续发光,这段时间延迟得很长(以秒、分、甚至小时计)则为磷光。

磷光 phosphorescence 见“荧光”。

八、傅里叶光学
Fourier Optics

傅里叶光学 Fourier optics 在光的衍射的基础上,采用通信理论中的频谱分析方法和线性系统理论,描述成像光学中,空间信息传递的光学新分支。其基本特点,是用空间频谱概念分析光的信息,用改变空间频谱的手段进行光信息处理。用空间频谱传递特性,评价光学仪器的成像质量。这一套独特方法,带来光学许多重要进展,如应用傅里叶综合技术的相衬显微镜,光学匹配滤波器和各种图像反差增强技术等,开创了光信息处理、空间滤波和全息照相的新领域。

二维傅里叶变换 two dimensional Fourier transform 两个空间自变量 x 和 y 的复函数 $f(x,y)$的傅里叶变换定义为:

$$\mathscr{F}\{f(x,y)\}=\iint_{-\infty}^{\infty} f(x,y)\cdot\exp[-i2\pi(f_x x+f_y y)]\,dx\,dy = F(f_x,f_y)$$

而 $F(f_x,f_y)$是两个自变量 f_x 和 f_y 的复函数,可用模和幅角表示:

$$F(f_x,f_y)=|F(f_x,f_y)|\cdot\exp i[\phi(f_x,f_y)]$$

式中 f_x,f_y 一般称为空间频率,$F(f_x,f_y)$称为 $f(x,y)$的傅里叶变换或空间频谱。$|F(f_x,f_y)|^2$ 为 $f(x,y)$的功率谱。相仿地,$F(f_x,f_y)$ 的逆傅里叶变换为 $f(x,y)$:

$$\mathscr{F}^{-1}\{F(f_x,f_y)\}=\iint_{-\infty}^{\infty}F(f_x,f_y)\exp[2\pi i(f_x x+f_y y)]\,df_x\,df_y = f(x,y)$$

$f(x,y)$可分解成形式为 $\exp[2\pi i(f_x x+f_y y)]$ 的基元函数的线性组合,$F(f_x,f_y)$为线性组合中的权重因子。

二维抽样理论 two dimensional sampling theory 在进行光学图像处理时,一个二维的连续图像往往不能用简单的或已知的函数来表示,往往采用图像平面上一些分立点上的物理量来表示。获取这些物理量的过程,就是抽样。如何选择分立点,分立点的空间间隔(抽样间隔)多少才可以不丢失信息,而对探测器又没有过分的要求,又能根据这些数据来恢复原来的图像,这些就是二维抽样理论要解决的问题。

惠特克-香农抽样定理 Whittaker-Shannon sampling theorem 一限带函数 $g(x,y)$,即其频谱仅在频谱平面上的一个有限的区域 R 内不均为零,设 $2B_x$ 和 $2B_y$

$$g(x,y)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}\sum_{m=-\infty}^{\infty} g\left(\frac{n}{2B_x},\frac{m}{2B_y}\right)\cdot\operatorname{sinc}\left[2B_x\left(x-\frac{n}{2B_x}\right)\right]\cdot\operatorname{sinc}\left[2B_y\left(y-\frac{m}{2B_y}\right)\right]$$

此公式称为 Whittaker-Shannon 定理。它表

明只要一些间隔合适的抽样值 $g\left(\frac{n}{2B_x},\frac{m}{2B_y}\right)$，就可以绝对正确地恢复一个限带函数 $g(x,y)$。在每一个抽样点上，乘上一个 sinc 函数再加起来，就可得到正确的复原。为了完全复原原来的图像，空间的抽样间隔：$\Delta x \leqslant 1/2B_x$，$\Delta y \leqslant 1/2B_y$，此即抽样定理的奈奎斯特(Nyquist)判据。而 $\Delta x = 1/2B_x$，$\Delta y = 1/2B_y$ 的抽样间隔，为临界抽样间隔。

抽样定理的奈奎斯特判据 Nyquist criterion of sampling theorem　见"惠特克-香农抽样定理"

临界抽样间隔 critical sampling interval　见"惠特克-香农抽样定理"

空间带宽积 space band width product　其定义为：$SW = \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y \cdot \iint \mathrm{d}f_x\mathrm{d}f_y = \Delta x\Delta y\Delta f_x\Delta f_y$。$S$ 代表图像的空间大小或面积，有时也代表透镜或光学仪器的有效像场，W 是信号(图像)在二维空间频率域(f_x、f_y)中的带宽，二者乘积为空间带宽积(SW)。空间带宽积是时间带宽积的空间模拟，时间带宽积确定了时间信号可分辨脉冲的总数，SW 也就确定了空间信号(图像)在像场中可分辨的像点数。根据抽样定理，如果图像在频域 f_x 方向的带宽为 Δf_x，其在 x 方向最小的间隔为 $\delta x = 1/\Delta f_x$。同理，在 y 方向最小的间隔为 $\delta y = 1/\Delta f_y$，当总的像场大小为 $\Delta x\Delta y$ 时，像场中可分辨的总像点数：$N = \frac{\Delta x\Delta y}{\delta x\delta y} = \Delta x\Delta y\Delta f_x\Delta f_y = SW$，同理，可证 SW 也代表空间频率域中的总抽样点数。SW 还有一些不变的特性。一些仪器和元件的典型 SW 如下表。

显微镜，TV 物镜	10^5
幻灯机	10^6
优良的摄影物镜 $F/2$，$f=50\mathrm{mm}$ 用于光圈 $F/4$ 时	10^7
长焦距航空侦察镜头	10^8
$100\mathrm{cm}^2$ Agfa FF 胶片	10^9
$100\mathrm{cm}^2$ Kodak 649 胶片	10^{10}

角谱 angular spectrum　根据傅里叶变换和逆傅里叶变换，在 $z=0$ 的平面上，复光场分布 $u(x,y,0)$ 可表示为：

$$u(x,y,0) = \int\int_{-\infty}^{\infty} U_0(f_x,f_y) \cdot \exp[2\pi\mathrm{i}(f_x x + f_y y)]\mathrm{d}f_x\mathrm{d}f_y$$

也就是一复函数，可看成简单的复指数函数 $\exp[\mathrm{i}2\pi(f_x x + f_y y)]$ 的集合，而一个复指数函数和一个以方向余弦(α,β,γ)传播的平面波(其振幅为 1)相似：

$$B(x,y,z) = \exp[\mathrm{i}2\pi(\alpha x + \beta y + \gamma z)]$$

其中 $\gamma = \sqrt{1-\alpha^2-\beta^2}$。在 $z=0$ 平面上，只要将 $f_x = \alpha/\lambda$，$f_y = \beta/\lambda$，两者完全相同。即 $u(x,y,0)$ 可看成，由许多按不同方向余弦传播的平面波组成，而各个平面波的复振幅就是 $U_0(f_x,f_y)\mathrm{d}f_x\mathrm{d}f_y$，其中 $f_x = \alpha/\lambda$，$f_y = \beta/\lambda$。$U_0(f_x,f_y)$ 为 $u(x,y,0)$ 的角谱，可由下式求得：

$$U_0\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda}\right) = \int\int_{-\infty}^{\infty} u(x,y,0) \cdot \exp\left[-\mathrm{i}2\pi\left(\frac{\alpha}{\lambda}+\frac{\beta}{\lambda}\right)\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y。$$

角谱的传播 propagation of the angular spectrum　其规律为：

$$U\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda},z\right) = U_0\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda}\right) \cdot \exp\left[\mathrm{i}\frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{1-\alpha^2-\beta^2}\,z\right]$$

对 $\alpha^2+\beta^2<1$ 角谱为 $U_0\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda}\right)$ 的光波，传播一段距离 z 后的效应只是改变各个角谱分量($\alpha/\lambda,\beta/\lambda$)的相对相位。这也是可以理解的，因为每个平面波按不同方向传播，它们到达给定点所走过的距离是不相同的，因而引入了相对的相位延迟。对 $\alpha^2+\beta^2>1$ 时，$U\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda},z\right) = U_0\left(\frac{\alpha}{\lambda},\frac{\beta}{\lambda}\right)\exp(-\mu z)$，其中 $\mu = \frac{2\pi}{\lambda}\sqrt{\alpha^2+\beta^2-1}$，$\mu$ 为正实数，表明这些波分量由于传播而剧烈衰减。对于 $\alpha^2+\beta^2=1$ 相当于传播方向垂直 z 轴的平面波，它们对 z

方向上的净能流没有贡献。

巴比涅原理 Babinet principle 巴比涅原理:在点光源照明下,两个互补的衍射屏 $u_0(x,y)$、$u_c(x,y)$在与点光源共轭的平面上,除了点光源的几何像点外,两者有着相同的夫琅禾费衍射图样。

互补衍射屏 complementary diffracting screen 所谓互补衍射屏,即:$u_0(x,y)+u_c(x,y)=1$,也就是衍射屏 $u_c(x,y)$恰好为衍射屏 $u_0(x,y)$的负片,或一个屏的开孔区域对应于另一屏的不透明区域。

空间不变线性系统 space invariant linear system 任一系统有一输入,就有一输出,也可以讲系统将输入函数变换成输出函数。如一照相机,有一物(输入)就相应产生一个像(输出),照相机的作用是将物变成一缩小的像。而凡是输入与输出间的关系,可用线性代数方程或线性微分方程或线性差分方程式来联系的系统,都是线性系统。如线性系统的输入输出为空间的函数(图像),此系统为空间线性系统。对空间线性系统,如其变换关系不因位置的不同而发生变化,这种系统就是空间不变线性系统。如优质的照相机就是空间不变线性系统,不管物在视场的何处,都能在不同位置上产生相同质量的像。一般来讲,光学系统在等晕区(像面上点光源的像斑形状相同的区域)内为空间不变线性系统。空间系统除了有线性空间不变外,还可能有线性空间变、非线性空间不变、非线性空间变的系统。而空间不变线性系统是最理想的,使图像形成的解释变得相当简单。

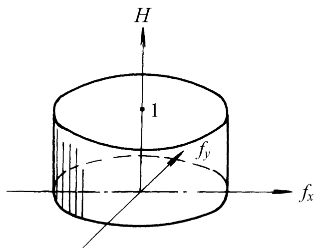
等晕区 isoplanatic district 见“空间不变线性系统”。

点扩散函数 point spread function 对光学系统来讲,输入物为一点光源时其输出像的光场分布,称为点扩散函数。在数学上点光源可用 δ 函数(点脉冲)代表,输出像的光场分布叫做脉冲响应,所以点扩散函数也就是光学系统的脉冲响应函数。

相干传递函数 coherent transfer function 又称为相干光照明下频率响应函数。在相干光照明下的空间不变线性系统,其输入输出的关系用频率域的语言讲,有:

$$O(f_x,f_y)=H(f_x,f_y)I(f_x,f_y)$$

其中 $O(f_x,f_y)$为输出函数(像的复振幅分布)的频谱,$I(f_x,f_y)$为输入函数(物的复振幅分布)的频谱。$H(f_x,f_y)$就是相干传递函数,它代表各个频率经过系统以后的振幅变化和相位移动。由于 H 为点扩散函数的傅里叶变换,而点扩散函数为系统的出射光瞳的傅里叶变换,这意味着相干传递函数与光瞳函数成正比。由于光瞳函数不是 1 就是 0,相干函数的值也是如此。在有限频带内频率响应为 1,没有振幅和相位的变化。如出瞳函数是圆形的,其相干传递函数见图。

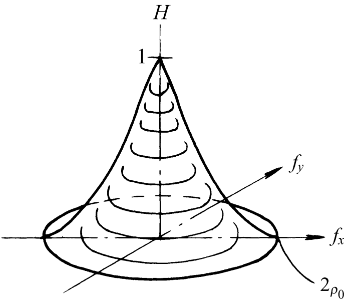


光学传递函数 optical transfer function 非相干光照明下的成像系统是对强度进行线性变换,在频率域中输出输入关系为:$O(f_x,f_y)=H(f_x,f_y)I(f_x,f_y)$,$O(f_x,f_y)$,$I(f_x,f_y)$各为输出、输入强度的傅里叶变换,$H(f_x,f_y)$通常称为系统的光学传递函数(OTF),它的模$|H|$称为调制传递函数(modulation transfer function,MTF)。由于光学传递函数为非相干光点扩散函数的傅里叶变换,非相干光点扩散函数是相干光的点扩散函数的模平方。而相干传递函数是相干点扩散函数的傅里叶变换,所以光学传递函数和相干传递函数有着以下关系:

$$H(f_x,f_y)=\frac{\int\int_{-\infty}^{\infty} H\left[\xi-\frac{f_x}{2},\eta-\frac{f_y}{2}\right]}{\int\int_{-\infty}^{\infty}|H(\xi,\eta)|^2}\times\frac{H^*\left[\xi+\frac{f_x}{2},\eta+\frac{f_y}{2}\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta}$$

在圆形的出瞳的情况下,其光学传递函数如图

所示。



光学传递函数的性质　properties of optical transfer function

(1) $H(0,0)=1$，零频时其值为 1；

(2) $H(-f_x,-f_y)=H^*(f_x,f_y)$，$H(f_x,f_y)$ 是厄米的；

(3) $|H(f_x,f_y)|\leqslant|H(0,0)|$，任何频率 MTF 总小于零频（直流分量）。

空间周期　spatial period　在矩形光栅或正弦光栅中，相邻两黑线条（或白线条）的距离叫做空间周期。使用光栅时，光栅常数就是空间周期。一个空间周期包含一个黑线条和一个白线条。

空间频率　spatial frequency　单位距离（1 毫米）内所包含的空间周期，叫做空间频率。空间频率也可以看做是每毫米内包含的黑线条数或白线条数。为不致含混，相邻的一根黑线条和一根白线条叫做一个线对，所以空间频率的单位用"线对/毫米"。空间圆频率为空间频率 2π 倍，其单位为"弧度/毫米"。

空间圆频率　spatial circular frequency　见"空间频率"。

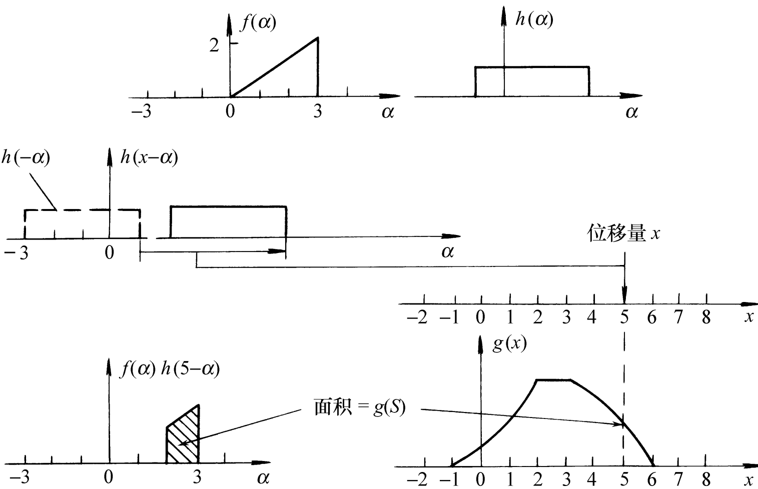
卷积　convolution　为傅里叶光学中经常使用的一种运算，其定义为：

$$g(x)=f(x)*h(x)$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}f(\alpha)h(x-\alpha)\mathrm{d}\alpha$$

式中 $*$ 是卷积运算的符号，$f(x)*h(x)$ 代表 $f(x)$ 和 $h(x)$ 的卷积。式中的积分表示求积分时，先反转 $h(\alpha)$，再沿 α 轴平移反转函数 $h(-\alpha)$ 一个量 x，用 $f(\alpha)$ 乘反转的平移函数 $h(x-\alpha)$，并计算在 $f(\alpha)h(x-\alpha)$ 下的面积。这样运算，只给出卷积的一个值，如果对平移量 x 的各个不同值重复运算，就可得到作为 x 的函数的卷积结果（其过程见图）。由于傅里叶变换中的卷积定理：

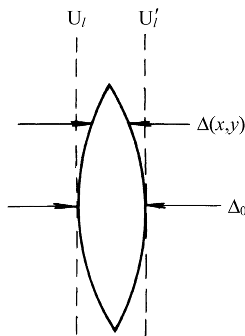
$a(x)*s(x)\xrightarrow{F.T.}A(f_x)\cdot S(f_x)$，其中 $a(x)\xrightarrow{F.T.}A(f_x)$，$s(x)\xrightarrow{F.T.}S(f_x)$



在空域中是较复杂的卷积运算，在频域中是较简单的相乘运算。同样，在频域中卷积运算，在空域中相当于相乘运算。

薄透镜的相位延迟效应 phase delay effect of a thin lens 由于透镜是由不同于空气的物质所组成，光通过透镜时，其速度不同于空气。由于透镜的特殊形状，各处厚度不同，所以光通过透镜后，各处引进了不同的相位延迟。球面透镜的厚度函数为：

$$\Delta(x,y)=\Delta_0-\frac{x^2+y^2}{2}\cdot\left(\frac{1}{R_1}-\frac{1}{R_2}\right)$$



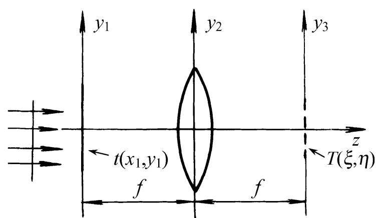
光通过透镜后，各处引进的相位延迟为：

$$t_l(x,y)=\exp[\mathrm{j}kn\Delta_0]\cdot\exp\left[-\mathrm{j}\frac{\pi}{\lambda f}(x^2+y^2)\right]$$

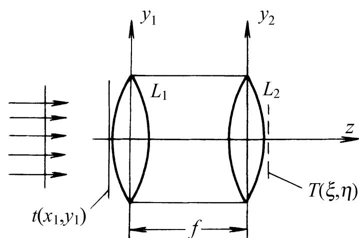
其中 f 为透镜的焦距，公式右边的第一项是常数位相延迟，而第二项可解释为一个球面波的二次曲面近似。在 f 为正时，此球面波向透镜后距离为 f 的一点会聚。f 为负时，此球面波可看成是从透镜前距离为 f 的一点处发射出来。总的来讲，球面透镜相位延迟作用是将一平面波变换成一个球面波。

透镜的傅里叶变换性质 Fourier transforming properties of lenses 在讨论光的衍射时，可知衍射物的夫朗禾费衍射（远区场）恰好就是衍射物的复振幅透过率函数的傅里叶变换。而观察衍射物的夫朗禾费衍射，往往要用透镜将在远区场出现的夫朗禾费衍射转移到近区场，也就是通过透镜可以使物的复振幅透过率函数的傅里叶变换出现在近处，透镜的这种功能就是透镜的傅里叶变换性质。正由于透镜这种二维傅里叶变换性质，使傅里叶分析方法在光学中得到卓有成效的应用。使原来要使用庞大、复杂设备（包含计算机）才能进行的傅里叶变换，在光学中可以用透镜组成的相干光系统简单迅速地完成。

准确傅里叶变换的光路 exact Fourier transforming configuration 有两种：一种是由一个透镜组成，见图（a）。在平行光照明下，物在透镜的前焦面，在后焦面上就可得到物场分布的准确傅里叶变换。一种是由两个相同焦距（f）的透镜组成，其间距为 f，见图（b）。在平行光照明下，物贴近第一个透镜，在紧靠第二个透镜的面上就得到物分布的准确傅里叶变换。



（a）



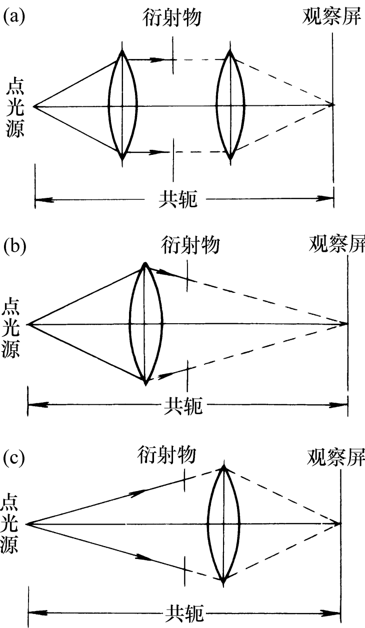
（b）

几种频谱分析光路 some configuration of frequency analysis 衍射物的频谱在如下三种照明情况下，都可出现在相应的观察屏上（见图）。

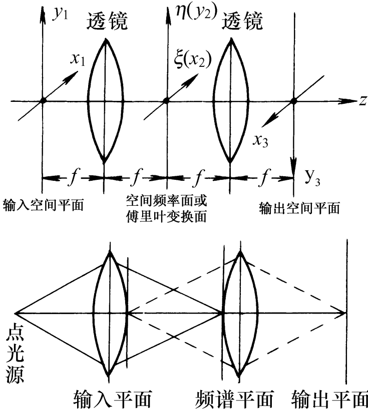
（a）平行光照明；

（b）会聚光照明；

（c）发散光照明。

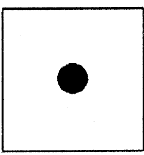


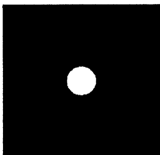
常用的相干光处理系统　common use configuration for coherent processing systems　这里是两种常用的光信息处理系统。在第一种系统中，输入面和输出面之间有两个相同焦距的透镜，其间的距离为 $4f$，所以又称为 $4f$ 系统。其中利用了前焦面和后焦面之间的严格傅里叶关系；所以常用作原理性解释的光路。

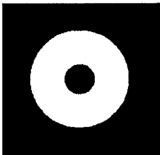


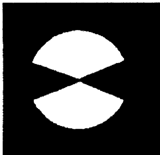
第二种光信息处理系统，是实验中常用的光信息处理光路。

空间滤波　optical filter　空间滤波就是指改变光信息的空间频谱。具体的讲，在光信息处理系统中(如 $4f$ 系统)的频谱面上用的各种各样的光阑，就是起着空间滤波作用。具体的器件通称为空间滤波器。图中所示是一些简单的空间滤波器。

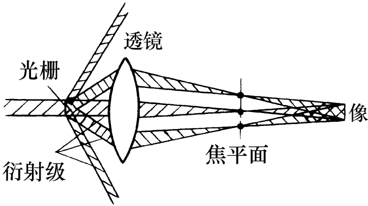

高通滤波器


低通滤波器


带通滤波器

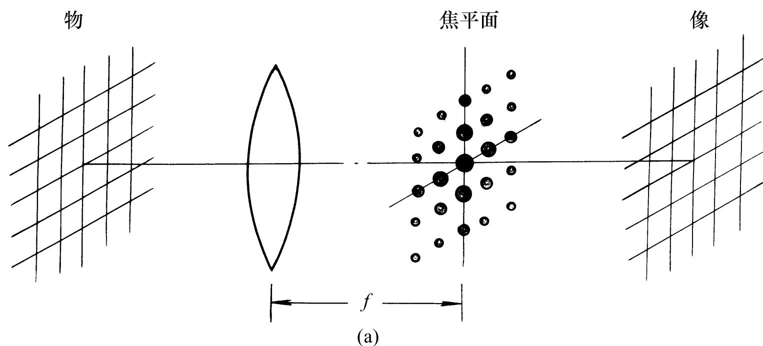

低通方向性滤波器

阿贝成像原理　Abbe principle of image formation　它是用波动的观点讨论成像过程，认为成像是分两步完成。第一步是经物平面发生衍射，在透镜后焦面上，形成夫朗禾费的衍射图。如物是一光栅，此衍射图是一系列的衍射斑。第二步是干涉，即各衍射斑发出的球面次波在像面上相干叠加，像是相干叠加的结果。这种两步成像的原理就是阿贝成像原理。用频谱语言讲，第一步，衍射使物体中各个频率的信息按不同方向传播，最后在透镜后焦面上的不同位置会聚，所以第一步是分频作用。

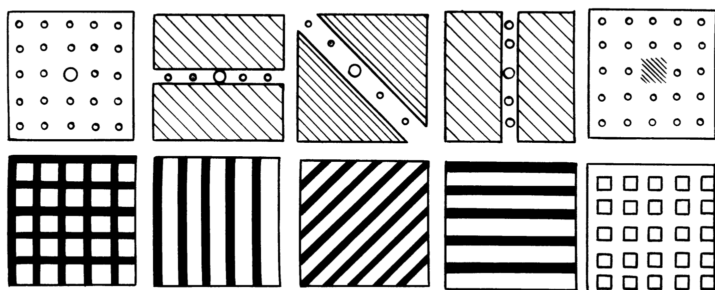


第二步，在像平面上相干叠加，是各种频率信息的合成。总的成像过程是一分一合。

阿贝-波特空间滤波实验 Abbe-Porter spatial filter experiment　此实验是对阿贝成像原理的验证和演示，其光路如图(a)。如物是一黑白正交光栅，在透镜的后焦面上出现黑白光栅的频谱。如果在后焦面上加上不同的光阑，使不同频谱参加最后的合成叠加，在像平面上将得到不同的结果。如图(b)，上面一列是处理后的频谱，下面一列是相应的像，上下一一对应。



(a)


(b)

相衬显微镜 phase-contrast microscopy　用普通显微镜观察无色透明的生物切片或晶片的样品时，图像的反衬很小，难以看清楚。泽尔尼克(F. Zernike)提出一个方法——位相反衬法。用光学厚度为 nh 的液滴，改变显微镜物镜后焦面上零频的相位，使图像反衬度发生变化，使原来看不清楚的图像得以看清楚。泽尔尼克提出的相衬法巧妙地实现了强度的相位调制，他因此获得 1953 年的诺贝尔物理学奖。

相衬法 phase-contrast method　见“相衬显微镜”。

衍射受限成像系统 imaging system of diffraction limited　是指一个没有几何光学像差的理想成像系统。它在成像过程中，仅受到系统中孔径光阑的衍射效应的影响。

无衍射光束 non-diffraction beam　衍射是波动的基本现象，光的衍射已被普遍接受，好像光的传播总伴随着光的衍射，光的横向振幅分布总与光的传播距离有关。事实上，光波传播时，它的电场和磁场是服从基本的波动方程：

$$\nabla^2\varphi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}$$

而这方程存在着无衍射模式解。如平面波就是无衍射模式解的一种，而

$$\varphi(x, y, z; k) = \exp(\mathrm{i}\beta z)J_0(\alpha\rho^2),$$

$$\alpha^2 + \beta^2 = k^2 \qquad x^2 + y^2 = \rho^2$$

当 $0<\alpha<k$ 时，$\varphi(x,y,z,k)$ 是波动方程的一个解，也代表一种无衍射光束，在任一垂直 z 的平面上其光强分布不变。由于此种光束有此独特优点，特别适用于长距离的测量，它的获得正是人们关心的课题。关于此种无衍射的概念，也适用于一切服从波动方程的波。

匹配空间滤波器 matched filter 如果一个空间滤波器的复振幅透过率 $H(f_x,f_y)$ 与输入信号 $s(x,y)$ 的频谱 $S(f_x,f_y)$ 共轭，即 $H(f_x,f_y)=S^*(f_x,f_y)$。这种空间滤波器称为匹配空间滤波器。匹配空间滤波器在光学特征（指字符、数字和其他携带信息的符号）识别中起着重要作用。在相干光处理系统中，在频谱面处放入一定的匹配滤波器，就可以根据输出平面上是否出现自相关峰值，判断输入信号中是否存在此待识别信号，以及根据相关峰的位置决定待识别信号在输入平面上的位置。匹配空间滤波器是复数滤波器，它可以用光全息方法或计算全息方法制作。

特征识别 character recognition 见"匹配空间滤波器"。

Vander Lugt 滤波器 Vander Lugt filter 这是由 A.B.Vander Lugt 提出的一种空间滤波器，它是用拍摄傅里叶全息方法制作的。尽管它是由吸收图样组成的干涉图，但通过干涉图样中条纹的对比度和条纹位置，能同时有效地将复滤波函数的振幅和位相信息记录下来。Vander Lugt 滤波器的全息制作方法，使空间滤波器不再需用更复杂方法来控制滤波器上的振幅和相位，从而也扩展了相干处理的应用领域。

二元光学 binary optics 一般指在片基表面上按二进制模式刻蚀成 2 个或 2 的 n（n 为整数）次方个深度等级的纯相位台阶分布，也包括透过率分布为 0，1 型的光学元件。纯相位台阶分布元件具有极高的衍射效率（理论上可达 100%）。这一类光学器件的设计与研制，发展成为光学的新分支——二元光学，相应的光学元件就称为二元光学元件。其工作原理是以光的衍射为基础，制作工艺与常规光学元件不同，采用了半导体微电子技术。它可以制作出重量很轻、尺寸很微小、造价低廉、有特殊功能的光学元件。因为二元光学器件的设计与制造是建立在现代高技术基础上，所以常被喻为 20 世纪 90 年代的光学技术。

九、全　息
Holography

全息照相 holography 光波具有振幅和相位二种信息，而普通照相底片所记录的仅是物体各点的光强（即振幅的平方），得到的是二维平面图像。全息照相记录的是物体各点的全部光信息，包括振幅和相位，能完全再现原物的波前，因而能观察到一幅非常逼真的立体像。英文 holography 来源于希腊文 holos 意思是全部，即信息的全部。

全息图 hologram 拍摄全息照相要用同一光源分出的二束相干光，现在则都用激光器输出的光。将其分为二束，一束投射到物体上，经物体反射或透射以后，产生物光束 O，再到达记录介质；另一束投射到记录介质（即感光底片）上，称为参考光束 R。参考光和物光相干叠加，在记录介质上形成干涉条纹，这就是全息图。

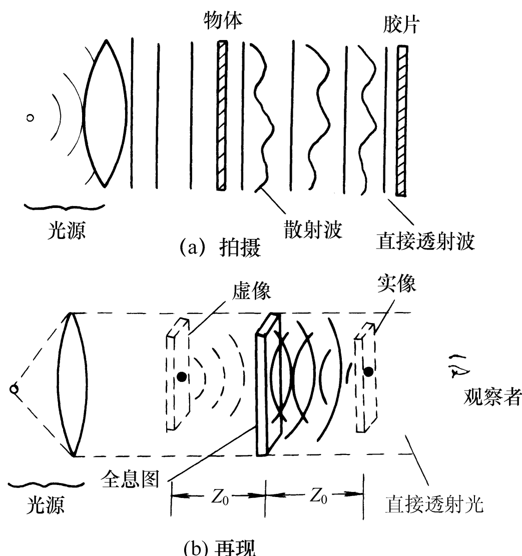
物光 object light 见"全息图"。

参考光 reference light 见"全息图"。

波前再现 wave-front reconstruction 用一束与参考光束的波长和传播方向完全相同的光束照射全息图，则用眼睛可以观察到一幅非常逼真的原物形像，悬空地再现在全息图后面原来的位置上。在再现过程中，布满干涉条纹的全息图起一块复杂光栅的作用，照明光束经全息图衍射后，产生了复杂的衍射场，其中包含有原物的波前，这就叫做波前再现。事实上物的波前有两个再现，一个波前好像是从原来的物体发散出来，形成物体的原始像（primary image），往往是虚像，第二个波前会聚产生第二个像，常为实像，也称为共轭像（conjugate image）。

共轴全息（伽伯全息） on axis hologram or Gabor hologram 伽伯首先用照相方法记录了一个从物体衍射的物光和直接来的平行参考

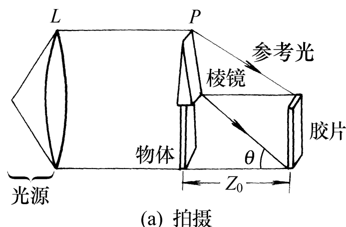
光相干产生的全息图，又称伽伯全息（Gabor hologram）再现时用同样的平行光照明全息图，此时产生两个像，一个为原始像（虚像），另一个为共轭像（实像），分别对称地位于全息图的二边，也称孪生像（twin image）。因为物光、参考光来自同一方向，且这二像又位于同一光轴上，故称同轴全息。此系统有两个缺点，一是因两个像位于同一光轴上，所以观察一个像时要受到另一个像的干扰，另外一个是被拍摄的透明物体上只能有很小的不透明区域，否则得不到直接照来的参考光束。



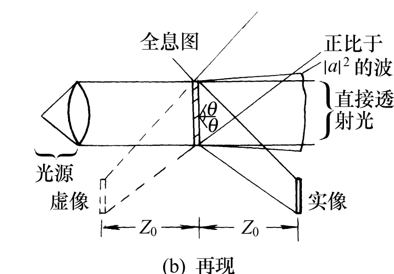
(a) 拍摄

(b) 再现

离轴全息（利思-乌帕特尼克斯全息） off-axis hologram or Leith-Upatnieks hologram　特点是与物光光轴成一定倾斜角方向引入一束相干的参考光。这不仅适用于透明物体也适应于非透明物体。因为可以分别观察再现的虚像和实像，像的质量也提高了。由于产生的二个像是与轴偏离的，故称离轴全息，又称利思-乌帕特尼克斯全息（Leith-Upatnieks hologram）。



(a) 拍摄



(b) 再现

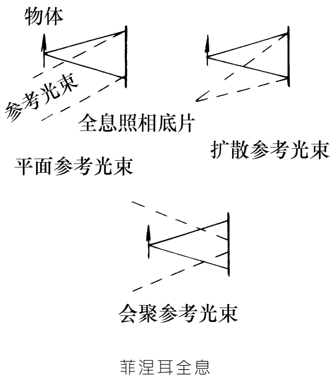
漫射照明全息 diffused illumination hologram　这种全息的特点是物体以漫射方式（如用乳白玻璃）来照明，物体上各点的光扩散开来覆盖整个全息图，因此只需全息图的一小部分就可以形成整个物体的像，仅分辨率比用整个全息图时有所降低。所以这类全息图也称冗余度全息。非漫射照明的全息图称非冗余度全息。大多数固体表面粗糙，是一种漫射物

体，所以制备这种物体的全息图时不需另用漫射方式来照明。

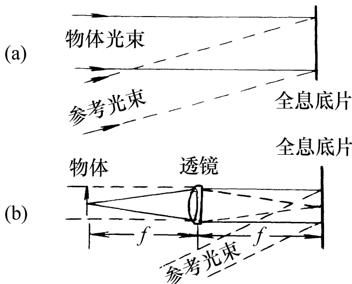
冗余度全息 redundant hologram 见“漫射照明全息”。

非冗余度全息 non-redundant hologram 见“漫射照明全息”。

菲涅耳全息 Fresnel hologram 菲涅耳全息与夫琅禾费全息这二种全息参考光都可用平行光，主要区别在物体。物体靠近底片为菲涅耳衍射故称菲涅耳全息。物体在无穷远处则可用夫琅禾费衍射描述故称夫琅禾费全息。广义地说若物体在透镜的焦平面上则照在底片上的是各个方向来的平行光也是夫琅禾费(Fraunhofer)全息。但这也是物光通过透镜后的傅里叶变换，故也称傅里叶全息。见“傅里叶变换”。



菲涅耳全息

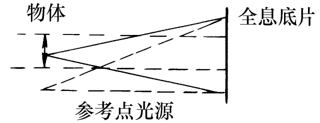


夫琅禾费全息

夫琅禾费全息 Fraunhofer hologram 见“菲涅耳全息”。

傅里叶全息 Fourier hologram 见“菲涅耳全息”。

无透镜傅里叶变换全息 non lens Fouriers transform hologram 当物体和参考点光源在同一平面上时，类似于干涉中的杨氏实验，物体上的每一点和参考点光源在底片上产生一组干涉条纹，其空间频率为一常数，这与傅里叶变换的特征相似，但未使用透镜，故称无透镜傅里叶变换全息。下图为无透镜傅里叶变换全息拍摄光路图。参见“空间频率”。



相位全息 phase hologram 普通照相底片记录下来的全息图只是干涉条纹明暗变化，当用光照射再现时总要吸收一部分光，这称吸收型全息。相位全息是透明的，在再现时改变的是再现波前的相位而不是振幅，改变的相位与摄制时曝光量的强弱相对应。这种全息图的特点是有非常高的衍射效率，相位全息效率理论上可达100%，而吸收型的效率一般只有6%(衍射效率定义为有用的衍射光通量与入射光通量之比)。可以用各种办法，如把曝光的黑色银粒漂白去掉黑度的变化得到相位全息。

衍射效率 diffraction efficiency 见“相位全息”。

记录介质 recording medium 记录介质是用来记录各种信息的介质。信息有声、光、磁、电、热等各种形式，记录的材料也是多种多样。有的可以直接记录，如底片记录光，有的却要通过转换，如录音要声转换成电，电再转成磁然后用磁带记录下来。对记录介质的要求有的还希望能擦除、反复使用等。如磁带，磁盘等。记录介质应当有足够好的灵敏度、分辨率、线性(即不失真)以及大存储容量、低噪声等。如全息照相用的记录介质即有：卤化银乳胶、重铬酸明胶、光致抗蚀剂、光导热塑料、光

致聚合物、光致折射材料等。

针孔滤波器 pin hole filter 激光可以会聚成非常小的一点,所以可作为一个接近于理想的点光源来产生球面波,这对于光学系统是非常有用的。但是激光又具有高度的相干性,空中的灰尘,光学元件或激光本身往往有一些散射光会形成干扰,因此要在会聚的点上放一小孔,使杂散光不能通过(如用10倍的显微镜物镜聚焦,则针孔直径约25μm)该针孔所起的作用就好像无线电中的滤波器一样,不允许其他空间频率的光通过,所以称针孔滤波器。

底片颗粒噪声 film grain noise 用照相底片记录信息时,因为底片是靠无数极细的卤化银颗粒来感光的,不管其颗粒多么细,它对空间频率的响应都是有限的,存在着一个截止频率,也就是底片的分辨率有一定的限制。由于底片颗粒引起分辨率的下降或像质的降低并带来不希望有的信息称为底片颗粒噪声。见"空间频率"。

体全息 volume hologram 也称厚全息(thick hologram)。全息图中干涉条纹有一定的间距 d,而记录介质的感光层也有一定厚度 l。当 $d \geqslant l$ 时,记录介质相当一薄层,这时为平面全息。当 $d \ll l$ 时,在记录介质厚度方向将满布干涉条纹构成一幅体全息。体全息内部因感光而析出的银粒分布也是三维的,如同晶体点阵一样,也是一个三维光栅,只有满足布拉格条件 $2d\sin\theta = k\lambda$ 才存在再现像。因此可适当改变参考光位置把许多全息图存储在同一底片上,再现时改变光源的角度就出现不同的像。

白光反射全息 white light-reflection hologram 是一种体全息,拍摄时物光和参考光从相反二侧照在底片上。再现时用一束普通白光,其波阵面与原来参考光的相似。这时只有在合适角度特定波长的光才能被这种体全息图反射成一个三维像。见"体全息"。

彩色全息术 colour holography 制作白光反射全息图时,如用三基色(红、绿、蓝)的激光来拍摄,再用白光再现,得到的就是一幅彩色三维像。见"白光反射全息"。

计算全息 computer generated hologram 这种全息图不是用照相方法得到的,而是用计算机计算出来的,制作时不需实物存在,只要有数学模型就可,用特定的编码方法制成能反映光场分布的计算全息图,微缩后用光再现。同样也有傅里叶变换全息及菲涅耳全息。这种全息图的制作有计算机参与,比一般光全息更灵活,应用更广泛。

360°圆全息 360° circular hologram 这种全息图的特点是底片为圆柱形,拍摄时物体放在圆柱形中心,光源从圆柱形顶部照射在物与底片上,形成经物体漫射的物光和参考光。再现时观察者从任一方向都可看到圆柱中心的虚像,十分逼真。

彩虹全息 rainbow holography 这是一种用白光再现的全息,特点是再现像的色彩随观察角度而变化有如虹一样,故称彩虹全息。彩虹全息拍摄方法一般分二步,先用普通方法拍摄一张透射全息图,以此全息图作为物,用一束逆平行于原始参考光的光再现实像,但照射的只是全息图上约10毫米的水平窄带,第二个全息图底片位于实像上,也用参考光照射拍摄,这样就得到彩虹全息图。用白光再现时这类全息图有较高的衍射效率,因为绝大部分衍射光向观察者眼睛方向散射,但缺点是牺牲了垂直方向的视差。

红外全息 infra-red holography 全息在军事上可提供目标立体形象所以是十分有用的,但可见光在大气及水中传播时衰减甚大,恶劣气候下甚至无法工作,因此发展出红外、微波及声全息技术,其原理与可见光技术完全一样,技术上的关键是寻找灵敏的记录介质和合适的再现方法。超声全息能再现潜伏于水下物体的三维形象,对可见光不透明的物体往往对超声波"透明",故可用作医疗诊断,工业上用作无损探伤。

声全息 acoustical holography 见"红外全息"。

微波全息 microwave holography 见"红外全息"。

全息干涉量度技术 interferometric hologram evaluation 利用二次曝光或连续曝光全息图可以将物体变化状况记录在同一张全息底片

上，再现时就得到相互交叠的像，这二个或多个光波就会发生干涉，从干涉条纹的分析中可以得出物体的变化情况，这就是全息干涉量度技术，利用它可研究物体微小形变或微小振动、高速运动的现象，封闭容器的爆炸过程等，这种方法的优点是可对任意形状、任意表面进行研究。

全息光学元件 holographic optical device 全息图可以起光学元件的作用，如一张点状物的全息图就是一个聚焦元件，优点是更方便和紧凑，全息光栅已用于光谱分析，扫描器中用全息图作为扫描元件。

全息显微术 holographic microscopy 全息显微术有二种。一种是改变再现光的波长和波前曲率能使全息照片所成的像比原物大，已得到放大率高达 100 倍左右的像。另一种是用普通显微镜来观察再现像。如要测量样品中浮动粒子的大小、分布时因为这些粒子在不断运动，所以不易将显微镜调焦到这些粒子上，更谈不上把这体积中的粒子全部拍摄下来。但全息照相能很方便地解决这些问题。如用短脉冲激光照明样品，拍摄一定体积内粒子运动情况，再现时就可将粒子大小、瞬时分布等情况用显微镜层层聚焦，逐次观察，这种方法的优点是景深长、分辨率也高。

粒子分析 particle size analysis 见“全息显微术”。

全息照相数据存储 holographic data storage 因为全息图是把物体各点的信息散布在整个底片面积上，而且还可利用乳胶的厚度获得体全息，加上全息图对尘埃、刻痕这些缺陷几乎是不敏感的，所以有其独特的优点。目前在 $1cm^2$ 的胶片上可存 10^7 个信息。比其他存储器要高 1 到 2 个数量级。见“体全息”。

符号识别 character recognition 再现全息照相的像时要用参考光照明，就可得到物光，反过来用物光照明也可得到参考光(如参考光是点光源当然应该得到一个光点)。这就是符号识别的原理，制作这种全息图是 Vander Lugt 提出来的，故也称 Vander Lugt 滤波器。符号识别时先制作这种符号的傅里叶全息图。(也就是制作 Vander Lugt 滤波器)，然后将它放在光信息处理系统中作滤波器用。在该系统的输入平面放上待处理的图像(其中包括要识别的符号)，这时在输出平面上即得到若干亮斑，这些亮斑反映了物平面上的特征信息，换言之，也就是用物光照明全息图得到再现的参考光点。

十、非线性光学
Nonlinear Optics

非线性光学 nonlinear optics 普通光源即使是太阳场强也只有 10V/cm，但一般要观察到非线性效应 E 最小也要 10^5V/cm，所以非线性光学又称强光光学(high light optics)，是研究强光与物质相互作用时物质以非线性响应入射辐射场的一个领域。非线性响应会导致媒质的特性随光强而变化，或者产生一些新频率的辐射场。非线性效应可以发生在固体、液体和气体中，可以包含一个或多个电磁场以及媒质的内激发，相关波长范围从红外到紫外。历史上非线性光学出现在激光之前，但现在这领域中大多数研究工作都是用大功率激光器来进行的。

强光光学 high light optics 见“非线性光学”。

表面非线性光学 surface nonlinear optics 表面非线性光学是表面物理的一个分支，也是非线性光学中的一个新领域。表面非线性光学效应是由光波与介质表面或交界面上的各种表面极化声子波的耦合而产生的。由于表面极化声子仅存在于靠近介质表面或交界面的很薄的表面层中，因此这种非线性效应带有特殊表面性质的信息，有可能作为表面探测和材料研究的一种独特的手段。

倍频 frequency doubling 频率为 ν 的辐射通过某种晶体材料传播出来时就成为二种频率的混合，一种是原来的频率 ν，另一种是新的频率 2ν，倍频是弗兰肯(Franken)等在 1961 年第一次观察到的，他们把脉冲红宝石激光器产生的波长为 6943Å 的光聚焦在一块石英晶体上，从而产生 3472Å 的二次谐波。倍频是一种

非线性效应，现在认为光的电磁辐射与固体中的电偶极子相互作用引起振动，这种振动使偶极子本身成为电磁辐射源。在偶极子振幅小时，其发射的辐射与入射辐射相同。随着入射辐射增强，偶极子振幅增大，结果非线性效应变得明显，偶极子的振动频率产生谐波，其中最强谐波是入射频率的二倍。故倍频也称产生第二谐波（second harmonic wave）。

二次谐波 second harmonic wave 见“倍频”。

混频 frequency mixing 不同频率 ω_1、ω_2 的二束光或多束光在非线性介质中叠加，得到 $\omega_1+\omega_2$ 的和频光波或 $\omega_1-\omega_2$ 的差频光波，这种现象称光的混频。在某些晶体、液体、气体内都能发生光的混频，利用混频可以获得需要波长的相干光。

相位匹配 phase matching 早期倍频的转换效率很低，仅约 1%，这是因为倍频的光与未倍频的光在晶体中以不同的速率前进，出现相消干涉。如果使其保持固有的相位关系，它们才可以完全相长地叠加，也就是使这二种频率的光折射率相同，能够以同样的速度传播，这时就可得到强得多的倍频光。这称为相位匹配，也称折射率匹配。见“倍频”。

折射率匹配 index matching 见“相位匹配”。

第一类相位匹配 type Ⅰ phase matching 又称平行相位匹配（parallel phase matching）由二列偏振方向相同的光波，组成一列倍频光波需要满足的相位条件。

平行相位匹配 parallel phase matching 见“第一类相位匹配”。

第二类相位匹配 type Ⅱ phase matching 又称正交相位匹配（orthogonal phase matching）。由二列偏振方向相互垂直的光波组合成倍频光波时需要满足的相位条件。

正交相位匹配 orthogonal phase matching 见“第二类相位匹配”。

相位匹配角 phase matching angle 当激光束与双折射晶体光轴成 θ_0 角度入射时，此时 *O* 光和 *E* 光的折射率相等，也就是在这个角度入射的基波所产生的倍频光波与基波以相同速度传播，实现了相位匹配，θ_0 称倍频相位匹配角。此角度要求较严，否则倍频效率明显迅速下降，这种通过选择角度达到相位匹配的方法又称临界相位匹配（critical matching）。

孔径效应 aperture effect 利用选择入射角的办法，虽可实现相位匹配，但因基波和倍频光波在双折射晶体中传播方向不相同，这样在晶体中传播了一段距离后，彼此便分开，倍频效率也大大下降了，这种现象称孔径效应。

90°相位匹配 90° phase-matching 当入射光与晶体光轴成 90°入射时，即相位匹配角取 90°时，这时基波和倍频光波都是沿垂直于晶体光轴方向传播，此时有希望最佳地利用倍频材料的非线性特性，所以这种方法又称最佳相位匹配。

倍频材料 frequency doubling material 倍频材料要求：①非线性极化系数高，这样可获得较高功率倍频光波；②有比较大的相位匹配允许偏差角 $\Delta\theta$；③有较高的功率破坏阈值；④材料对基波和倍频光波的吸收系数很低。常用的倍频晶体有 ADP、KDP 等。

光学参量放大器 optical parametric amplifier 是混频现象的应用，在一块非线性晶体内，使一束频率为 ω_p 的很强的波（称抽运光）和一个较低频率 ω_s 的弱信号波成拍，ω_s 是准备放大的信号。这样晶体中产生 $\omega_i=\omega_p-\omega_s$ 的差频波称为无效光（Idler），其振幅正比于抽运光振幅和信号光振幅的乘积。此无效光再与抽运光成拍，由于差频作用辐射出频率 ω_s 的信号光波，其振幅正比于无效光振幅与抽运光振幅的乘积，因此信号被放大了。这就是参量放大原理，对非线性晶体的要求类似于倍频晶体。

光学参量振荡器 optical parametric oscillator 光学参量振荡器是一种类似激光器的、可以在很宽范围内调谐的光源，发射从紫外到红外的相干辐射，其原理是根据光学参量放大效应制成的一种光振荡器。把一块非线性晶体（如铌酸锂）的二个平坦的平行端面涂上敷层构成法布里-珀罗共振腔。信号频率和无效频率对应于共振腔的二个共振峰，当抽运光的通量密度足够大时，能量就从抽运光转移到信号振荡

模式和无效振荡模式，随之而来的就是这些频率上相干辐射能量的发射。通过改变温度、电场等来改变晶体的折射率，振荡器就可以调谐。见“光学参量放大器”。

自聚焦 self-focusing 某些材料受强光照射时，材料折射率发生与光强相关的变化。当照射光束强度在横截面的分布是高斯形时（即钟形），而且强度足够产生非线性效应的情况下，此时材料（如 CS_2）折射率的横向分布也是钟形的，因而材料好像会聚透镜一样能会聚光束。这种效应可以持续下去，一直到光束达到一个细丝极限为止。

自散焦 self defocusing 与自聚焦相似，但这些物质的非线性折射率是负数，如硫化镉在一定光功率时就是这样的，此时光束增强的地方折射率反而变小，因此高斯光束在这样物质中传播时发散，其作用好像通过了一个凹透镜一样。见“自聚焦”。

自调制 self modulating 当输入到非线性介质中的激光为脉冲时，由于光强是时间的函数，引起的折射率变化 $\Delta n \propto |E|^2$ 也是时间的函数。因此光的相速（相位）受到时间的调制，从而导致光谱的加宽。这就是自相位调制。

双光子吸收 two-photon absorption 通常原子要从低能级跳跃到高能级去必须吸收一份相当于二个能级之差的能量。如果这份能量由光辐射来提供，只有在光子的能量为二个能级之差时才会被原子所吸收。但是在高功率的光束下，虽然一个光子的能量还达不到二个能级之差，但原子可以同时吸收二个光子达到一定的能量而完成一次跃迁，这就是双光子吸收。

自变透明 self transparent 当激光很强时，物质吸收系数也与光强有关。有些染料在弱光下不透明，强光下物质中的分子一半处于激发态，吸收系数正比于上、下能级之差，此时吸收系数为零。这种现象称为自变透明。

集成光学 integrated optics 集成光学是电子学和激光技术相结合的一门学科，与电子学的集成电路相似，集成光学是把各种光学模拟块集合在集成电路那样大小的衬底上。光学模拟块包括薄膜器件，例如调制器、方向耦合器、开关、光学双稳态器件、透镜、模拟/数字转换器、谱分析器等。这样无需担心震动、元件之间的耦合、温度、灰尘或潮湿。很小的一块器件就可以有多种功能，同一集成光学元件可以作调制器、开关或方向耦合器用。集成光学实际上是研究平面光学器件和平面光学系统的理论、技术与应用。其理论基础是导波光学，技术基础是薄膜技术和微电子技术。当前主要是研究和开发光通信、光传感、光信息处理和计算机所需的多功能、稳定可靠的光集成回路，特别是光电集成回路。

导波光学 guided wave optics 导波光学是集成光学的理论基础。它研究介质波导中光的发射、传输、耦合、调制、偏转、开关、探测和光与物质相互作用的微观过程，它是综合应用光学（包括电磁场理论）、激光物理、固体物理的一门边缘学科。

介质波导 dielectric waveguide 介质波导是集成光学系统及其元件的基本结构单元。它主要起限制、传输、耦合光波的作用。按截面形状可分圆波导（光纤）和平面波导二大类。集成光学中主要考虑的是平面波导。最简单的平面波导由薄膜、衬底、覆盖三层平面介质构成，其折射率是不相同的。如薄膜厚度与光波波长在同一数量级，光波在这种波导中传播时只是在厚度方向上受限制，这称二维波导。如薄膜在宽度方向上尺寸也可与波长相比拟时，则光传播时受到二个方向上的限制，这称条形波导或三维波导。

平面波导 plane waveguide 见“介质波导”。

二维波导 two dimensional waveguide 见“介质波导”。

条形波导 bar waveguide 见“介质波导”。

三维波导 three dimensional waveguide 见“介质波导”。

均匀波导 homogeneous waveguide 根据波导层折射率分布可分为均匀与非均匀波导，均匀波导的各层介质折射率均为常数，非均匀波导的折射率随空间坐标而变。

非均匀波导 inhomogeneous waveguide 见“均匀波导”。

量子阱激光器 quantum-well laser 一般半

导体激光器有源层厚度约为 0.1～0.3μm，当有源层厚度减薄到玻尔半径或德布罗意波长数量级时，就出现量子尺寸效应，这时载流子被限制在有源层构成的势阱内，该势阱称为量子阱。这导致了自由载流子特性发生重大变化。量子阱激光器比起其他半导体激光器具有更低的阈值，更高的量子效率，极好的温度特性和极窄的线宽。量子阱激光器的研制始于 1978 年，已制出了从可见光到中红外的各种量子阱激光器。

分布反馈激光器 distributed feedback laser 普通半导体激光器是利用半导体的解理面或抛光镜面构成法布里-珀罗（F-P）共振腔提供集中反馈的，但这种制造工艺不利于集成化。分布反馈（简称 DFB）及分布布拉格反射（简称 DBR）激光器是在激光器有源波导区界面附近制作周期光栅来提供反馈，这是利用光波导折射率的周期变化来实现的。其中 DFB 的特点是把光栅直接做在有源层与限制界面上。而 DBR 是把光栅做在有源层二端。这些激光器不仅具有极好的性能和便于集成化，经改进还易于实现稳定的单模运转。

分布布拉格反射式激光器 distributed Bragg reflecting laser 见“分布反馈激光器”。

非线性光波导 nonlinear optical waveguide 光波导结构中至少有一层材料，在工作条件下，呈现出非线性光学效应，这种波导称为非线性光波导。见“介质波导”。

导波光学器件 guided wave optical device 导波光学器件是以光导波的传输为基础的器件，如光耦合器、波导光栅器、光调制器与开关、光逻辑元件以及波导几何光学器件等都是光波导的一部分。按习惯对需要外部驱动的器件，如电光调制器与开关都划归有源器件，而无需外部驱动的器件则划归无源器件。

光耦合器 optical coupler 将光耦合进波导或从波导耦合出光能，或者将光从一个波导耦合到另一个波导，这种功能都是由光耦合器来完成的。它们是构成集成光路的一种基本器件。本质上光耦合器是起光波模场变换的作用。

波导光栅器 waveguide grating 波导光栅器实际上是光波导受到一种周期微扰，它可以是表面形状的周期变化，也可以是波导表面层内折射率的周期变化，或者是二者的结合，可以应用在光偏转、模式转换及滤波等方面中。

光调制器 optical modulator 光调制器是将信息载入光波的一种器件，其功能是使光波的某一参量随调制信号而变。光开关的功能是使光波开通、切断或者使其空间位置随调制信号而变。所以光开关是一种特殊的光调制器。许多器件同时具有调制与开关的功能。调制的种类按调制参数来分有相位调制、偏振调制、强度调制等，按调制信号来分，也有模拟调制和脉冲编码调制之分。

波导几何光学器件 waveguide geometric optical device 波导几何光学器件是工作原理建立在几何光学基础上的波导器件，主要有反射镜、棱镜、透镜、偏振器等。这些器件对导波光束起转向、准直、会聚、扩束、控制偏振态等功能，为无源波导器件。

光逻辑器件 optical logic device 波导电光调制器与开关，原则上都能作二进制逻辑运算器，作为逻辑单元，要求响应速度快、消光比高、功耗低　插入损耗小，结构简单、稳定、尺寸小、便于制作等。

光开关 optical switch 见“光调制器”。

光学双稳态器件 optical bistable device 光学双稳态器件是利用物质的非线性光学特性而制成的一种新型光学器件。对于这种器件，输入光在同一状态下，输出光可能有二个稳定的状态。光学双稳态器件的输入-输出特性类似于铁磁体的磁滞回线。在某一时刻光学双稳态器件究竟处于二个稳定状态中的哪一个状态，取决于器件的前一时刻的状态。见“磁滞回线”。

光学双稳态 optical bistable 见“光学双稳态器件”。

光学双稳态器件的应用 applied optical bistable device 根据光学双稳态器件的输入输出特性，选择不同工作点，可以用作光回路的各种基本器件。工作点的选择方法是通过一个连续输入光作偏置，类似于电子学，可以用作光学差分放大器，光功率限幅器，光学鉴

别器、光学锁存器、光学逻辑元件等。

光计算机 optical computer 电子计算机的速率始终限制在电子学所能达到的范围。而光计算机理论速率可达每秒100亿～1000亿次,比目前最快的电子计算机速率高100～1000倍,存储容量大100万倍。用集成光学来实现光信号的逻辑运算,不仅具有电子器件的各种功能,而且开关速度快,不受电磁干扰,还可进行并行处理,具有信息容量大、宽带等优点。随着集成光学正从实验研究走向开发应用阶段,它将为光计算机的研制奠定基础。

自适应光学 adaptive optics 1953年巴布柯克(Babcok)提出自适应光学的概念,20世纪80年代进入实用阶段。它是一门集科学性和工程性为一体的综合学科,研究实时自动改善光波波前质量的理论、系统、技术和工程。自适应光学系统按补偿波前畸变的原理可分为校正式和非线性光学式二大类,按使用要求又可分为像式和发射激光式二类。目前已有一些自适应光学系统应用在天文和军事领域中,使光学观测能力达到了接近衍射极限的水平。

相位复共轭光学 phase complex conjugate optics 相位复共轭光学是对光波的相位信息进行空间和时间上的处理。当它是通过光波与物质的非线性相互作用来实现时,就称为非线性光学相位复共轭,在数学上等价于对复空间振幅进行复共轭运算。这种处理对自适应光学、光学信号处理、光学成像处理、光学计算机、超低噪声探测、干涉仪及非线性激光光谱学等有重要影响,因为这种系统是全光学的,不需要复杂的电子或电子机械设备,所以更具有实用性。

相位共轭波 phase conjugate wave 相位共轭波的特性是与原始波有相同的频率,且其空间复振幅为原始波的空间复振幅的复共轭。能对光波实现相位复共轭作用的光学系统称相位共轭镜。从点光源发散的发散光束经共轭镜反射后,形成一会聚共轭光束,此光束精确地沿入射光的路径返回到原始点光源处。由于具有这种性质,所以当后向共轭波再次通过相位畸变介质,可以使相位畸变得到补偿,因此有广泛应用。

相位共轭镜 phase conjugate mirror 见“相位共轭波”。

十一、激 光
Laser

激光 laser 1960年美国人Maiman首先制成第一个激光器(红宝石激光器)。有人认为这不仅在光学史上,在科学史上也是一个伟大的里程碑。激光称为laser是由英文light amplification by stimulated emission of radiation的首位字母组成,具有三个特点:(1)方向性好,可以仅仅在衍射规定的小角度内发散,如10cm直径的激光光束照在384000km远的月球表面上,光束直径不超过5km;(2)相干性好,氦氖激光的相干长度可达数十米甚至数百米;(3)功率密度大,可以把全部能量集中在一个很小的范围内,一般激光的亮度远比太阳亮度强。一个聚焦的几千瓦的连续CO_2激光光束可以在约10s内把一块1/4in(≈0.64cm)的不锈钢板烧穿一个洞。

激光器 laser 常用激光器构成可分为固体激光器(红宝石、钕玻璃、钇铝石榴石等)、半导体激光器(砷化镓等)、气体激光器(氦氖、氩离子、氮离子、氦镉离子、二氧化碳等)、液体激光器(染料溶液等)。工作波长从紫外、可见到红外光。工作方式有连续式的,也有脉冲的。功率从毫瓦级直到兆瓦级(脉冲),根据不同需要而定。

激光振荡器 laser oscillator 即激光器。

受激发射 stimulated emission 1917年爱因斯坦(Einstein)指出,受激的原子能够通过二种途径发射光子而回到一个较低的态。一种是原子无规则地变到低能态,这称为自发发射。另一种是一个具有能量等于二能级间能量差的光子与处于高能态的原子作用,使原子产生发射,这称为受激发射。受激发射具有二个特性,一是产生光子的能量几乎等于引起受激发射光子的能量,所以有近似相同的频率;二是这二个光子相联系的光波是同相位的,偏振状态相同,传播的方向也相同,所以是相干的。

激光是由于受激发射而产生的，因此具有受激发射的特性。

自发发射 spontaneous emission 见“受激发射”。

粒子数反转 population inversion 通常物质中大多数原子处于基态，吸收比受激发射要容易得多，但是如果高能级中的粒子数（即原子数）多于低能级的粒子数时将使受激发射占优势，这种情况称为粒子数反转。

亚稳态 metastable state 在一个具有 N 个能级的系统中，受激原子通过自发辐射或无辐射跃迁回到较低的受激态或基态，原子在受激态有一平均的逗留时间，一般约 10^{-8}s 数量级。但也有一些能级较低的受激态，原子逗留的时间比较长，约为毫秒数量级，这种状态称为亚稳态。利用亚稳态的这种特性，可以使基态的粒子数减少时而中间态的粒子数增多，从而实现粒子数反转。见“粒子数反转”。

光泵 optical pumping 激光器工作物质的粒子最初大多数是处于基态，通过激励后才处于激发态。用光来激励的称光泵。如红宝石激光器工作物质是红宝石，激励是用脉冲氙灯的强光，其作用像一只水泵一样把低能态的粒子抽运到高能态来，故称光泵。

三能级系统 three energy levels system 第一台激光器——红宝石激光器是三能级系统。红宝石是三氧化二铝，在其基质中有三能级 E_0，E_1，E_2，E_0 是稳态，E_2 是激发态，E_1 是亚稳态。处于 E_0 的粒子被激发到 E_2，粒子在 E_2 是不稳定的，约 10^{-7}s 内很快地自发无辐射地落入亚稳态 E_1，粒子在 E_1 逗留时间较长约 10^{-3}s。只要激发足够强，亚稳态的粒子数增多，基态的粒子数减少，从而实现粒子数反转。三能级激光器中，获得中间能态和基态间粒子数反转的效率不是很高。因为在开始抽运时中间能态（即亚稳态）实际是空的，最低限度要将基态粒子数的半数抽运到中间态才可实现粒子数反转。此外，供给抽运的闪光氙灯对电能只有一小部分成为抽运光子。所以要用强抽运光，通常采用脉冲工作。

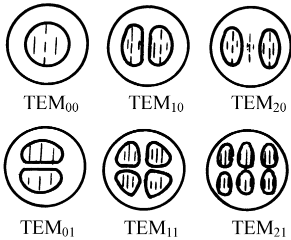
四能级系统 four energy levels system 第一台连续工作的激光器是氦氖激光器，它是一个四能级系统，由 E_0、E_1、E_2、E_3 组成，处于基态 E_0 的原子被激发到最高能级 E_3，从 E_3 无辐射地下降到亚稳态 E_2，因为能级 E_1 在基态上足够高，它实际上是空的。这样，在 E_2 中只要有较少数粒子数就可保证 E_2 和 E_1 间的粒子数反转。所以在这二个能级间就能够发生激光作用。由于这个原因四能级激光器比三能级的效率高，而且容易获得连续运转。

激光反射镜 laser reflection mirrors 激光反射镜要求吸收和散射尽可能小，所以不能用吸收很强的银和铝来做，因为它们不可能得到十分高的反射率。通常是在高质量光学基片上根据波长要求交替淀积不同折射率的薄膜制成，有平面也有凹面的，其中有一些是轻度透明的，以便获得足够的能量输出，由这些反射镜组成光学共振腔。见“光学共振腔”。

光学共振腔 optical resonance cavity 产生激光需要二个条件，一是工作物质中的粒子数反转；二是要建立一个光学共振腔。共振腔实际上是二面相对的反射镜，工作物质就放在中间。共振腔起二个作用。一是使轴向光束来回反射（实际上是振荡）以便不断和激发态的粒子作用产生受激发射，其中一面反射镜是轻度透明的使部分能量能够输出。另一作用是使轴向进行的光束中符合多光束干涉增强的波长谱线宽度变窄、强度增加，其他方向的光束则反射数次就偏出腔外，别的波长因干涉相消而抵消，故共振腔还起限制光束的方向及光的频率的作用（见“粒子数反转”）。用二面反射镜组成的共振腔有五种，即：平行平面的，大半径的、共焦的、同心的及半球形的等五种。

横模 transvers mode 激光是沿着激光器光轴方向传播的，其电场很接近于和轴向垂直，所以称为 TEM_{mn} 模（是英文横向电磁的缩写），也称横向电磁模式，脚标 m、n 是光束截面 x、y 方向上的波节数。横模很容易观察，只需把光束截面积放大就可以观察到。其起因较复杂，如稍偏离轴向走 Z 形的光经多次反射仍未偏出腔外能符合干涉加强的条件，结果就产生各种复杂图样。其中 TEM_{00} 模也称基模或单相模是用得最多的，因为（1）其光束截面

上的光通量密度是理想的高斯型;(2)光束截面上各点的电场没有相位移动,因此是完全空间相干的;(3)光束的发散角最小,这种模式可以聚焦成最小的光点。



高斯光束 Gaussian beam 光束截面上光强分布是理想的高斯型称高斯光束,用方程表示可写为 $I=I_0e^{-\frac{2r}{\omega^2}}$, I_0 是光轴中心上的强度, r 为离中心的距离, ω 是强度降到为中心强度 e^{-2}倍的 r 值。通常规定 ω 为激光光束的半径,因为光强的 86.5%的能量包含在这一块面积内。

纵模 longitudinal modes 也称轴模(axial mode)。光学共振腔二反射镜间沿轴向进行的光束,由于腔长 L 与光波波长比是一个很大的数目,所以有许多不同波长的光能符合加强反射的条件,即 $2nL=k_1\lambda_1=k_2\lambda_2=\cdots$, n 为工作物质的折射率, k 是纵模模数,由于激光的单色光存在着一定的线宽,故在这个范围内,能获得干涉加强的模数还是有限的几个。

选模 mode selection 选模有纵模选择与横模选择二种(longitudinal mode selection and transverse mode selection)。纵模选择是通过适当的方式限制激光器振荡光的频率或波长(纵向模式)。常用的方法有:(1)较短的共振腔;(2)放一对平行平板起法布里-珀罗标平具的作用以限制纵模数;(3)组合干涉腔法,用一个干涉仪系统代替普通共振腔的一个镜面;(4)环形共振腔法;(5)色散腔,用棱镜或光栅分离不需要的波长。横模选择是通过适当方式限制光束的横向振荡模式,常用的方法是选择曲率半径合适的反射镜及适当的腔长,使其他阶的模式受到高的衍射损耗而抑制,只剩下基模在运转。

锁模 mode locking 对多纵模振荡,用适当的方法使振荡模的频率间隔保持一定,并使模之间的相位保持一致,使它们能互相干涉,则激光输出具有一定时间间隔的脉冲序列,这就是模式锁定。锁模可以产生脉冲宽度短到只有皮秒的强光脉冲,方法有自锁和强制锁模二种。锁模技术提供了在时间上、空间上分辨率极高的强脉冲,有着重要的应用价值。

***Q* 开关 *Q* switching** 仿照无线电工程中微波腔 Q 值的概念,激光器共振腔 Q 值的定义为:贮存在共振腔的能量与每周期内损失的能量之比。Q 开关的原理是先使共振腔的 Q 值保持在较低的水平,如令共振腔停止振荡,这样被抽运到长寿命亚稳态原子数就大为增加,从而使很高程度的粒子数反转,再突然提高共振腔的 Q 值,随着所有的大量原子几乎一致掉到低能态,激光器就发出一个功率巨大的巨脉冲(可高达数百兆瓦)。如红宝石激光器通常 1ms 内释放出来的脉冲能量为 10J,如用 Q 开关使脉冲时间降为 10ns,则功率输出将由 1kW 增大到 10^9W。常用 Q 开关有机械的(转镜、机械斩光器)、电光快门、声光快门及染料调 Q 等。

红宝石激光器 ruby laser 原理参见"三能级系统",发出的激光为波长 6943Å 的脉冲激光,缺点是输入能量大、输出能量小,效率不到 0.1%,绝大部分能量转化为热能。因为脉冲时间间隔决定于散热措施,所以脉冲时间间隔受到限制,而且单色性较差,相干长度仅毫米数量级。

钕玻璃激光器 Nd glass laser 这种激光器比红宝石激光器优越之处是能量转换效率比较高可达 1%,可以用于 Q 开关、脉冲也可连续工作,常用波长为 1.06μm。

钇铝石榴石激光器 YAG laser YAG 的转换效率也较高,达 1%,常用波长为 1.06μm, 1.08μm,可以连续工作。

半导体激光器 semiconductor laser 全称为半导体结型二极管激光器。主要用半导体材料砷化镓(GaAs)等制成。优点是体积小(只是针头大小的一个半导体片)、重量轻、寿命长、转换效率高,可达 10%,其频谱范围可从红外

到紫外，可以连续发光，但输出光束发散较大，有广泛用途。现已用在光纤通信、视频唱片及声频唱片的光源、指向器、扫描器及集成光学中。

激光二极管 laser diode 激光二极管也就是半导体激光器。见“半导体激光器”。

气体激光器 gas lasers 气体激光器效率高，波长的选择范围宽，受环境影响比较小和输出很接近于理想相干光源，所以是很普遍使用的一种激光器。常见的有氦氖激光器、氩离子激光器、氦镉激光器、二氧化碳激光器、氮分子激光器等。

氦氖激光器 helium-neon gas laser 这是研制成功的第一种气体激光器，也是最常用的一种，通常在可见光频段(6328Å)工作，其他还有1.1523μm及3.3913μm，但不常用。功率一般约数毫瓦，连续发光。因为制造方便、较便宜、可靠，所以使用较多。由于单色性好，相干长度可达数十米以致数百米，其工作原理参见“四能级系统”。

氩离子激光器 argon ion laser 氩离子激光器主要是在绿、蓝、紫色区域工作(主要是4880Å、5145Å二种)。输出通常是数瓦的连续光，但也可在脉冲下工作。与氦氖激光相比氩离子激光器通常功率更大、波长更短、线宽较宽、价格较贵。

氦镉激光器 helium-cadmium laser 氦镉激光器有波长最短的连续输出(4416Å，3250Å)，激光管中有氦和金属镉蒸气的混合体，操作方法和氦氖激光器十分相似。

二氧化碳激光器 CO_2 laser; carbon dioxide laser 二氧化碳激光器在红外波段工作，波长为10.6μm，效率可高达20%，输出功率可从数瓦大到数千瓦，所以是效率最高，连续工作功率最大的激光器。

氮激光器 nitrogen laser 这种激光器为脉冲输出3371Å紫外光，特点是不需共振腔，所以称为超辐射激光器。主要是激励方式上采用行波激励法造成粒子数反转从而产生激光，因其结构简单，所以很容易制造。

液体激光器 liquid laser 某些液体，通常是一些有机染料，可以设法使其发出激光，故又称染料激光器。因液体有很高的光学质量，价格则几乎可以忽略，而且可以用循环的方法来冷却。此外还可以用多种方法在很宽的频率范围内调谐液体激光器。现在常用的一种染料为若丹明6G的水溶液，用氙闪光灯或其他激光激发可以使它发出激光。染料激光器的转换效率高，有时可达25%，已有各种染料可在整个可见光范围内获得所需的激光。

染料激光器 dye laser 见“液体激光器”。

连续可调谐染料激光器 continuously tunable dye laser 因液体中能带较宽，发出的激光波长有的宽达100Å。用一个衍射光栅作为共振腔的一个反射镜，连续改变光栅角度就可使特定波长光反射最强，这样就可以调谐激光器的波长。

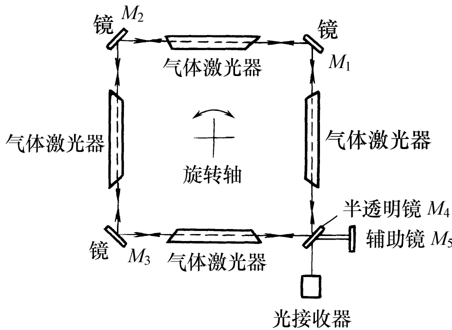
自由电子激光器 free electron laser 利用自由电子的受激辐射把电子束的能量转换成相干辐射的激光器在1977年研制成功。改变电子束的加速电压就可改变激光波长，原则上可以在任意波长上运转。在现有的电子枪和加速器的实验条件下，可获得从毫米波到1000Å的光频波段范围内连续调谐的相干辐射。自由电子激光器在短波长、大功率、高效率和波长可调节这四大主攻方向上为激光学科开辟了一条有广阔应用前景的道路。

激光测速 measurement of velocity by laser 激光测速是测量移动物体反射回来光的频率由于多普勒(Doppler)效应发生的偏离，在被测物体是热的或者是易碎的不能用接触法时，这种方法是很有用的，已用此法测出轧钢机中炽热钢坯的移动速度。

激光测距 laser ranging 激光测距有三种方法，干涉测量法、光束调制法及脉冲回波法。干涉测量法因空气扰动只能测10m内的距离，用测量干涉条纹的移动数来测距，可测出1/10条纹的移动，测量10m的长度可达亿分之几的准确度。光束调制法可把不同的调制频率最高为50GHz加到氦氖激光束上测量反射回的光束就可测出距离，1km以内可分辨至1mm。脉冲回波法，因激光的线宽窄、发散角小，所以对不希望的光鉴别率高，用高功率的脉冲激光器，测出发射激光和反射回来的时间间隔，用

它的一半乘以光速就求出距离。脉冲越短，测定就越精确。利用这技术测量地球到月球的距离已精确到±15cm。

激光陀螺 laser gyroscope 激光陀螺是用来测量转动的，如图所示。由方环形激光器和放在正方形四角上的反射镜组成。反射镜与放在正方形四边上的氦氖激光放电管成45°角。调整反射镜使得光在每面镜子上反射形成一个光学环。放电管提供光源和放大作用，反射镜提供同相反馈，环振荡的要求就得到满足。此系统固定于惯性系统中，不论顺时针方向或逆时针方向都经过相同的光程，其频率相同。若环形激光器以顺时针方向绕轴转动时，沿转动方向的光波长必稍增长，反向的波长必稍缩短。二者之差正比于速率，很容易测出。因结构简单，牢固可靠，灵敏度、准确度高，响应快，有可能成导航、控制或制导的核心部件。



激光通信 laser communication 激光通信是以光波作为载波，用信息振幅对载波加以调制来实现的。因光波频率在$5\times10^{13}\sim10^{15}$Hz之间，如用于电话通讯，假定一路电话需要5kHz，则光波可容10^8路电话。且激光有高单色性，易将无关的光滤掉，有高的信噪比。目前半导体激光器因体积小、寿命长，所以已广泛使用于光纤通讯上。但在大气或空气中直接传输激光则因大气吸收、散射和易被障碍物挡住，故还只限于短距离的使用。

激光用作热源 laser as a hot source 由于激光束高度平行，通过透镜可使之聚焦于很小一点，在这里产生高温，使材料熔化或汽化，靠急剧膨胀的冲击波还可穿透工作物质，利用这个原理可进行焊接、打孔、切割及在医疗上用于眼科如焊接视网膜等。

激光同位素分离 laser isotope separations 通过激光辐照选择性地激发同位素粒子，使其物理或化学性质发生变化而实现同位素分离，已成功地分离了数十种元素的同位素，与传统方法比较，分离系数较大，装置简便，用这种方法可浓缩铀。

激光受控热核聚变 laser controlled thermonuclear fusion reaction 轻原子核（氢、氘、氚核等）聚合成为较重的原子核，并释放出大量核能的反应称核聚变反应。但核聚变反应需要在$10^7\sim10^9$K以上的高温才能有效地进行。激光受控热核聚变是将激光分成多束，从各个方向均衡地照射在氘、氚混合体作的小靶丸上，巨大的脉冲功率密度使靶丸在很短时间内高度压缩，并产生高温，在它来不及飞散之前完成核聚变反应。

激光冷却和捕陷中性原子 laser cooling and capturing neutral atom 1997年朱棣文和克罗德·科恩-塔努吉（Claude Cohen-Tannoudji），威廉·菲利普斯（William D. Phillips）因研究激光冷却和捕陷中性原子的成就获得诺贝尔物理学奖。主要原理是利用原子对光的吸收、再自发辐射。原子每次吸收一个光子都得到与其运动方向相反的动量，而发射光子的方向却是随机的，故自发辐射损失的动量为零，因而多次重复下来吸收得到的动量随次数而增加，原

子因此被减速。现在冷却温度已达 10^{-9}K 的极低温度，开辟了新的原子物理、分子物理和光物理研究的领域。在实用上可望将原子钟精度提高二个量级，对生物学和高分子聚合物等研究都十分有价值。

十二、统计光学
Statistical Optics

统计光学 statistical optics　在光场的产生、传播和检测过程中，有许多不可避免的随机因素造成光场和信号的涨落，因此近代光学中越来越多的问题需要用概率统计的方法进行分析和处理，从而形成了新的光学分支——统计光学。其内容可以从狭义和广义两方面来说，从狭义上说，统计光学是研究光场的统计性质，所用的数学工具是随机变量和随机过程理论；从广义上说，凡应用随机过程、相关函数、统计估值等概率统计方法来分析光学问题，都属于统计光学范围。由于激光的相干时间长，涨落慢，激光器的发明加上测量单个光电事件的快速探测器的发展，使观察光场的涨落成为可能。所以统计光学在激光出现后的年代中得到迅速发展。

干涉条纹的可见度 visibility of interference fringes　为了定量的描述光源的单色性和光源尺寸对干涉条纹对比度的影响，迈克尔逊引入了干涉条纹的可见度函数，它定义为 $\nu(x,y)=\dfrac{I_{max}-I_{min}}{I_{max}+I_{min}}$，其中 I_{max}和 I_{min}是干涉条纹的极大值和极小值。

对单色点光源的双光束干涉，$I_{max}=I_1+I_2+2\sqrt{I_1I_2}$，$I_{min}=I_1+I_2-2\sqrt{I_1I_2}$，则可见度函数为：$\nu=\dfrac{2\sqrt{I_1I_2}}{I_1+I_2}$。显然，当 $I_1=I_2$ 时，有 $\nu=1$，可见度达极大值，相当于完全相干情况；如 $I_{max}=I_{min}$则 $\nu=0$，可见度达极小值，干涉场光强分布为常数，不出现干涉条纹，称为完全不相干；当 $0<\nu<1$ 时，对应部分相干情况。

一般情况下，干涉场中不同的区域干涉条纹的可见度是不同的，所以定义式中的 ν 是位置坐标的函数，I_{max}和 I_{min}可看做是(x,y)点附近强度的极大与极小。

干涉条纹的对比度 contrast of interference fringes　见“干涉条纹的可见度”。

完全相干光 complete coherent light　见“干涉条纹的可见度”。

非相干光 incoherent light　见“干涉条纹的可见度”。

部分相干光 partially coherent light　见“干涉条纹的可见度”。

互相干函数 mutual coherence function　互相干函数是描述部分相干光场的基本物理量，它描述具有一定相对时间延迟，位于两个空间点上的光场之间的相关性。设有一扩展的多色光源，它发出的光照射到杨氏装置上，在观察平面上 Q 点的光场为

$$V(Q,t)=K_1V(P_1,t-r_1/c)+K_2V(P_2,t-r_2/c) \quad (1)$$

K_1, K_2 为传播函数，它反映从 P_1 和 P_2 发出的次波的相位比入射波超前 $\pi/2$，故 K_1, K_2 为纯虚数。观察强度为

$$\begin{aligned}I(Q)&=\langle V(Q,t)V^*(Q,t)\rangle\\&=|K_1|^2I_1+|K_2|^2I_2\\&\quad+2|K_1K_2|\Gamma_{12}^r(\tau)\end{aligned} \quad (2)$$

其中$\langle\rangle$表示对时间取平均，$\tau=(r_1-r_2)/c$，$\Gamma_{12}^r(\tau)$是函数 $\Gamma_{12}(\tau)$的实部。

定义：$\Gamma_{12}(\tau)=\langle V_1(t+\tau)\cdot V_2^*(t)\rangle=\lim\limits_{T\to\infty}\dfrac{1}{2T}\int_{-\infty}^{\infty}V_1(t+\tau)\cdot V_2^*(t)\mathrm{d}t$ 为互相干函数。当 P_1 和 P_2 点重合时，有 $\Gamma_{11}(\tau)=\langle V_1(t+\tau)V_1^*(t)\rangle$，$\Gamma_{11}(\tau)$称为自相干函数。如取 $\tau=0$，则它的光强度为 $\Gamma_{11}(0)=I_1$，$\Gamma_{22}(0)=I_2$。当 P_1 单独打开时，在 Q 点的光强为 $I_1(Q)=|K_1|^2I_1$，同样有 $I_2(Q)=|K_2|^2I_2$。引入归一化函数：$\gamma_{12}(\tau)=\dfrac{\Gamma_{12}(\tau)}{[\Gamma_{11}(0)\Gamma_{22}(0)]^{1/2}}$，则光强为

$$I(Q)=I_1(Q)+I_2(Q)+2\sqrt{I_1(Q)I_2(Q)}\,\gamma_{12}^r(\tau)$$

$\gamma_{12}(\tau)$称为复互相干度，$\gamma_{12}^r(\tau)$是其实部。

复互相干度 complex mutual coherent degree

见“互相干函数”。

自相干函数 auto-coherence function 定义：$\Gamma_{11}(\tau)=\langle V_1(t+\tau)V_1^*(t)\rangle$，$\Gamma_{11}(\tau)$称为自相干函数。引入归一化函数 $\gamma_{11}(\tau)=\frac{\Gamma_{11}(\tau)}{\Gamma_{11}(0)}$，$\gamma_{11}(\tau)$称为复自相干度。

复自相干度 complex auto-coherent degree 见“自相干函数”。

互谱密度函数 mutual spectral-density function 互相干函数是一解析函数，满足傅里叶变换存在条件，可作傅里叶展开：

$$\Gamma_{12}(\tau)=\int_0^\infty d\nu\exp(-i2\pi\nu\tau)\cdot\lim_{T\to\infty}\left[\frac{\tilde{V}_1(\nu)\tilde{V}_2^*(\nu)}{2T}\right]=\int_0^\infty G_{12}(\nu)\exp(-i2\pi\nu\tau)d\nu,$$

也存在逆傅里叶变换：

$$G_{12}(\nu)=\begin{cases}\int_{-\infty}^{\infty}\Gamma_{12}(\tau)\exp(i2\pi\nu\tau)d\tau, & \nu>0\\ 0, & \nu<0\end{cases},$$

函数 $G_{12}(\nu)$称为在 P_1 与 P_2 点处光振动的互谱密度函数。互相干函数 $\Gamma_{12}(\tau)$和互谱密度函数 $G_{12}(\nu)$是一傅里叶变换对。

当 P_1 与 P_2 重合时，自相干函数 $\Gamma_{11}(\tau)$的傅里叶变换 $G_{11}(\nu)$称为 $V_1(t)$的功率谱，即频谱密度函数。

对复相干度也有类似关系，即 $\gamma_{12}(\tau)=\int_0^\infty g_{12}(\nu)\cdot\exp(-i2\pi\nu\tau)d\nu$，其中 $g_{12}(\nu)=\frac{G_{12}(\nu)}{\sqrt{\Gamma_{11}(0)\Gamma_{22}(0)}}$。对复自相干度 $\gamma(\tau)=\gamma_{11}(\tau)=\int_0^\infty g(\nu)\cdot\exp(-i2\pi\nu\tau)d\nu$，其中 $g(\nu)=g_{11}(\nu)$为归一化谱密度函数。

相干时间 coherence time 习惯上，时间相干性以相干时间 τ_c 或相干长度 L_c 表示，并认为中心波长 λ_0，光源的有效光谱波长宽度 $\Delta\lambda$ 和频带宽度 $\Delta\nu$ 满足如下关系：$\tau_c=\frac{1}{\Delta\nu}$，相干长度为 $L_c=c\tau_c=\frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda}$。但由于不同物理机制的光源有不同的光谱分布线型，使相同的 $\Delta\nu$ 也有不同的相干时间，因此需要一个精确的定义。根据复自相干度的性质来定义相干时间是合适的，按照迈克尔逊的建议，相干时间定义如下：$\tau_c=\int_{-\infty}^{\infty}|\gamma(\tau)|^2d\tau$。其中 $\gamma(\tau)$是复自相干度。

对低气压放电管的单谱线加宽是由于运动辐射振子发光的多普勒位移引起的多普勒加宽，其谱密度函数为高斯型分布函数，其相干时间为

$$\tau_c=\sqrt{\frac{2\ln 2}{\pi}}\frac{1}{\Delta\nu}=\frac{0.664}{\Delta\nu}。$$

对高压气体放电管的谱线加宽是由于辐射的原子或分子的碰撞引起的碰撞加宽，其谱密度函数为洛伦兹线型，其相干时间 $\tau_c=\frac{1}{\pi\Delta\nu}=\frac{0.318}{\Delta\nu}$。相干长度随之决定。

常用光源的时间相干性表

光源类型	平均波长 λ/nm	波长范围 Δλ/nm	相干长度/cm
汞弧灯	546.1	10	<0.03
特制汞弧灯	546.1	1	<0.3
氩激光器	514.5	$\approx 9\times10^{-3}$	<30
氦镉激光器	441.6	$\approx 7\times10^{-4}$	<275
氦氖激光器	632.8	$3\times10^{-5}\sim10^{-6}$	$\approx 10^6$

相干长度 coherence length　见“相干时间”。

互强度 mutual intensity　应用准单色光源，则光场满足窄带和小程差这两个准单色条件，小程差意味着在干涉范围内衬比几乎一致，与 τ 无关，即可简化互相干函数 $\Gamma_{12}(\tau)$ 和复相干度 $\gamma_{12}(\tau)$，与 $\Gamma_{12}(0)$ 和 $\gamma_{12}(0)$ 的差别可忽略。令 $J_{12}=\Gamma_{12}(0)$ 表示 P_1 和 P_2 点的互强度，$\mu_{12}=\gamma_{12}(0)$ 为复相干系数。

$$J_{12}=\Gamma_{12}(0)=|\Gamma_{12}(0)|\exp[\mathrm{i}\alpha_{12}(0)]$$
$$=J_{12}\exp(\mathrm{i}\beta_{12}),$$
$$\mu_{12}=\gamma_{12}(0)=\frac{\Gamma_{12}(0)}{[\Gamma_{11}(0)\Gamma_{22}(0)]^{1/2}}$$
$$=\frac{J_{12}}{[J_{11}J_{22}]^{1/2}}=|\mu_{12}|\exp(\mathrm{i}\beta),$$
$$\beta_{12}=\alpha_{12}(0)=\arg\mu_{12},$$

因为 J_{12} 和 μ_{12} 与时间差 τ 无关，显然，任一点 Q 的强度分布均在两个与 τ 无关的极限值之间变化

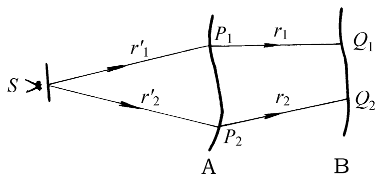
$$I(Q)=I_1(Q)+I_2(Q)+2\sqrt{I_1(Q)I_2(Q)}\cdot|\mu_{12}|\cos(\beta_{12}-\delta),$$

条纹的可见度：$\nu=\frac{I_{\max}-I_{\min}}{I_{\max}+I_{\min}}=\frac{2\sqrt{I_1I_2}}{I_1+I_2}|\mu_{12}|$。在准单色光照明下，条纹具有恒定的可见度和相位，只存在空间相干性。

复相干系数 complex coherent coefficient　见“互强度”。

互强度的传播 propagation of mutual intensity　范西特-泽尼克定理和霍普金斯公式给出了互强度分布为：

$$J(P_1,P_2)=\int_\sigma V(S,P_1)\cdot V^*(S,P_2)\mathrm{d}S$$
$$J(Q_1,Q_2)=\int_\sigma V(S,Q_1)\cdot V^*(S,Q_2)\mathrm{d}S$$



由惠更斯-菲涅耳原理光源 S 在 Q_1 点产生的光扰动，可以看做在 A 面上所有点光扰动对 Q_1 点的贡献之和，即

$$V(S,Q_1)=\int_A V(S,P_1)\exp(\mathrm{i}\bar{k}r_1)\cdot\Lambda_1/r_1\mathrm{d}s_1$$
$$V(S,Q_2)=\int_A V(S,P_2)\exp(\mathrm{i}\bar{k}r_2)\cdot\Lambda_2/r_2\mathrm{d}s_2$$

$$J(Q_1,Q_2)=\iint_A\left[\int_\sigma V(S,P_1)V^*(S,P_2)\mathrm{d}S\right]\cdot\exp[\mathrm{i}\bar{k}(r_1-r_2)]\cdot\Lambda_1\Lambda_2^*/r_1r_2\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2$$
$$=\iint_A J(P_1,P_2)\exp[\mathrm{i}\bar{k}(r_1-r_2)]\cdot\Lambda_1\Lambda_2^*/r_1r_2\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2$$

这就是泽尼克的互强度传播公式。如果 Q_1 点和 Q_2 点重合则互强度变为点的强度，即：

$$I(Q)=\iint_A J(P_1,P_2)\cdot\exp[\mathrm{i}\bar{k}(r_1-r_2)]\cdot\Lambda_1\Lambda_2^*/r_1r_2\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2$$
$$=\iint_A\sqrt{I(P_1)}\sqrt{I(P_2)}\cdot\mu(P_1,P_2)\exp[\mathrm{i}\bar{k}(r_1-r_2)]\cdot\Lambda_1\Lambda_2^*/r_1r_2\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2$$

上式说明任一曲面上一点 Q 的光强，是由它前面任一曲面上所有各对面积元 $\mathrm{d}s_1$ 和 $\mathrm{d}s_2$ 的光强所决定；$\mu(P_1,P_2)$ 为权重因子，$\exp[\mathrm{i}\bar{k}(r_1-r_2)]\Lambda_1\Lambda_2^*/r_1r_2$ 因子是表征传播过程中相位延迟和振幅衰减。因此上式可看为惠更斯-菲涅耳原理的另一种表达形式，称为广义惠更斯原理。

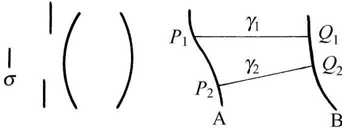
互相干函数的传播 propagation of mutual coherence function　光场在空间传播时要发生变化，与此相似，互相干函数在光场传播时也同样受到变化。如在某一平面上的互相干函数已知，要求在另一个面上相应的互相干函数，称为互相干函数传播问题。自由空间的光场为一实数场，满足波动方程。互强度是 $\tau=0$ 时的互相干函数。在准单色光条件下，互相干

函数 $\Gamma_{12}(\tau)=J_{12}\exp(-i2\pi\nu_0\tau)$，其中 $\tau=(r_2-r_1)/c$，由霍普金斯公式有

$$\Gamma(P_1,P_2,\tau)=\int_\sigma V(S,P_1)\cdot V^*(S,P_2)\exp(-i2\pi\bar{\nu}\tau)\mathrm{d}S,$$

$$\begin{aligned}&\Gamma(Q_1,Q_2,\tau')\\&=J(Q_1,Q_2)\cdot\exp(-i2\pi\bar{\nu}\tau')\\&=\iint_A J(P_1,P_2)\frac{\exp[i\bar{k}(r_1-r_2)]}{r_1r_2}\cdot\exp(-i2\pi\nu_0\tau')\Lambda_1\Lambda_2^*\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2\\&=\iint_A\Gamma\left(P_1,P_2,\tau'-\frac{r_1-r_2}{c}\right)\cdot\frac{\Lambda_1\Lambda_2^*}{r_1r_2}\mathrm{d}s_1\mathrm{d}s_2\end{aligned}$$

这就是互相干函数的传播公式。B 面上的 Q_1 和 Q_2 的互相干函数可用 A 面上的所有点对的互相干函数来表示。



时间相干性　temporal coherence　研究在光场中的一个固定点上两个不同时刻的光扰动之间的相关性，这就是时间相干性。时间相干性由自相干函数 $\Gamma_{11}(\tau)$ 和复自相干度 $\gamma_{11}(\tau)$ 来描述。研究时间相干性的最典型的装置是迈克尔逊干涉仪。

$$\begin{aligned}I(Q)&=I_1(Q)+I_2(Q)\\&\quad+2\sqrt{I_1(Q)I_2(Q)}\,|\gamma_{11}(\tau)|\\&\quad\cdot\cos[\alpha_{11}(\tau)-2\pi\nu_0\tau],\end{aligned}$$

其中 τ 为光通过干涉仪两臂的时间差。可以看出迈克尔逊干涉仪的干涉图特性由光源的复相干度 $\gamma_{11}(\tau)$ 决定。光波的时间相干性由其功率谱惟一确定。

空间相干性　spatial coherence　为了考察光源的空间相干性，最好采用单色光源以消除光谱宽度的影响。理想的单色光源并不存在，准单色光源则可以实现，描述准单色光场的互强度函数 J_{12} 和复相干系数 μ_{12} 与时间差 τ 无关，对准单色光只存在空间相干性。时间相干性和空间相干性一般是不可分割的，因为都要服从波动方程，然而有一类光学场，$\gamma_{12}(\tau)=\gamma_{11}(\tau)\gamma_{12}(0)$，即时间相干性和空间相干性可以分离，这样的场称为交叉频谱纯。在一定的条件下，时间相干性由光的频谱特性确定，空间相干性由光源的几何性质确定。

相干体积　coherent volume　为了统一考虑光场的时间相干性和空间相干性，我们设想一个称之为相干体积的一部分空间，沿着光传播的方向的尺寸决定于相干长度 l_c，垂直于传播方向的截面的线度决定横向空间相干性间隔 Δ_c，截面面积的大小指相干面积 A_c。我们定义相干体积为：

$$(\Delta V)_c=l_cA_c\approx\frac{\lambda_0^2}{\Omega}\left(\frac{\lambda_0}{\Delta\lambda}\right)。$$

相干面积　coherent area　习惯上，空间相干性常以相干面积表示。相干面积可定义为：

$$A_c=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\mu(\Delta x,\Delta y)|^2\mathrm{d}\Delta x\mathrm{d}\Delta y,$$

利用范西特-泽尼克(Van Cittert-Zeralike)定理可证明对于任意形状面积为 A_s 的均匀非相干光源，距离为 z 处的相干面积为 $A_c=\frac{(\lambda_0z)^2}{A_s}\approx\frac{(\lambda_0)^2}{\Omega_s}$，式中 Ω_s 为光源对观察区原点所张的立体角。有时用横向空间相干间隔 Δ_c(毫米)，如把相干面积看做矩形微面元，则

$$\Delta_c=\sqrt{A_c}=\frac{\lambda_0z}{\sqrt{A_s}}。$$

范西特-泽尼克定理　Van Cittert-Zeralike theorem　互强度和复相干度是描述准单色光场的基本物理量。范西特-泽尼克定理则给出了扩展非相干准单色光场的互强度和复相干度的计算公式。设想扩展的面光源是由许多足够小的面元组成，其线度远小于光源到屏的距离，设光源与屏间媒体为均匀的，各个面元在屏上任意两点 P_1 和 P_2 所产生的光扰动可以写为

$$V_1(t)=\sum_m V_{m1}(t),$$

$$V_2(t)=\sum_n V_{n2}(t),$$

互强度可写成

$$J(P_1,P_2)=\langle V_1(t)V_2^*(t)\rangle$$
$$=\sum_m\langle V_{m1}(t)V_{m2}^*(t)\rangle$$
$$+\sum_{m\neq n}\sum\langle V_{m1}(t)V_{n2}^*(t)\rangle,$$

由于各个面元的光辐射没有确定的相位关系，故 $m\neq n$ 的面元对互强度的贡献为零。于是，$J(P_1,P_2)=\sum_m\langle V_{m1}(t)V_{m2}^*(t)\rangle$。如果将第 m 面元看做点光源，它到 P_1 和 P_2 点的距离为 r_{m1} 和 r_{m2}，则该面元在 P_1 和 P_2 点的光扰动为

$$V_{m1}(t)=A_{m1}\left(t-\frac{r_{m1}}{\nu}\right)\cdot\frac{\exp[-i2\pi\nu_0(t-r_{m1}/\nu)]}{r_{m1}},$$

$$V_{m2}(t)=A_{m2}\left(t-\frac{r_{m2}}{\nu}\right)\cdot\frac{\exp[-i2\pi\nu_0(t-r_{m2}/\nu)]}{r_{m2}}。$$

在准单色条件下 $r_{m2}-r_{m1}$ 比相干长度小得多，可认为面元的光扰动振幅 $A_{m1}=A_{m2}=A_m$，波速为 v，$(r_{m1}-r_{m2})/\nu$ 因子可忽略。考虑光源的连续性，用积分的形式表示为

$$J(P_1,P_2)=\int_\sigma I(S)\frac{\exp[ik_0(r_1-r_2)]}{r_1r_2}dS,$$

式中 $k_0=2\pi\nu_0/\nu=2\pi/\lambda_0$ 是平均波数，r_1 和 r_2 是光源到 P_1 和 P_2 点平均距离。

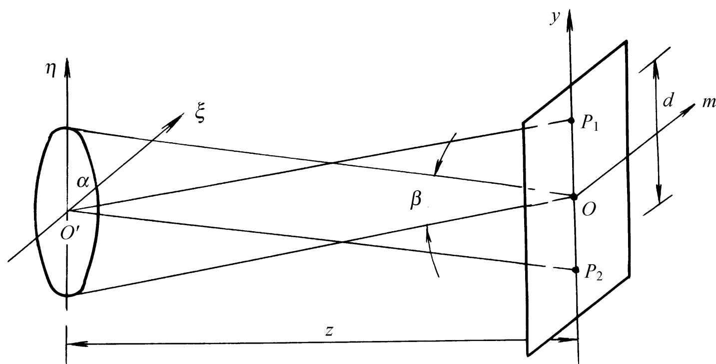
复相干系数

$$\mu(P_1,P_2)=\frac{1}{\sqrt{I(P_1)}\sqrt{I(P_2)}}\cdot\int_\sigma I(S)\frac{\exp[ik_0(r_1-r_2)]}{r_1r_2}dS。$$

如果满足远场条件，光源上某点 S 的坐标为 (ξ,η)，可简化为 $\frac{1}{r_1}-\frac{1}{r_2}\approx\frac{1}{z^2}$，令 $\frac{x_1-x_2}{z}=P$，$\frac{y_1-y_2}{z}=Q$，$\psi=\frac{k_0[(x_1^2+y_1^2)-(x_2^2+y_2^2)]}{2z}$，范西特-泽尼克(Van Cittert-Zeralike)定理可表示为

$$\mu(P_1,P_2)=\{\exp(i\varphi)\iint_\sigma I(\xi,\eta)\cdot\exp[-ik_0(p\xi+q\eta)]\cdot d\xi d\eta\}/\iint_\sigma I(\xi,\eta)$$

除因子 $\exp(i\psi)$ 外，复相干系数等于光源强度分布函数的傅里叶变换。



霍普金斯公式 Hopkins formula　范西特-泽尼克(Van Cittert-Zeralike)定理曾假设源-屏空间为均匀介质，霍普金斯将它推广到不均匀或由不同的折率均匀小区域。介质不均匀性使平均波数 k 的变化，引入介质透射函数 $k(s,p,\nu)$，它代表位于 S 处的面元 $d\sigma$ 的准单色光源在 p 处产生的复扰动，用 $i\lambda k(s,p,\nu)$ 代替因子 $\exp(ikr)/r$，则互强度变为下式

$$J(p_1,p_2)=\lambda^2\int_\sigma I(S)k(s,p_1,\nu)\cdot k^*(s,p_2,\nu)dS,$$

同样可得

$$\mu(p_1,p_2)=\frac{\lambda^2}{\sqrt{I(p_1)}\sqrt{I(p_2)}}\cdot\int_\sigma I(S)\,\mathcal{K}(s,p_1,\nu)\cdot\mathcal{K}^*(s,p_2,\nu)\,\mathrm{d}S。$$

可用于非相干光源产生的场的复相干度，不必直接应用平均过程。

热光 thermal light 由大量受激发的原子或分子独立而无规地随机地通过自发辐射发出的光称为热光，也称为混沌光(chaotic light)。各个基元辐射体发射的波列的位相关系随机变化，因而由此叠加构成的热光场有两个特点：热光场有剧烈的随机涨落和热光场服从高斯统计，这是由中心极限定理得到的直接结果。所谓一阶统计，就是求光场中一点瞬时振幅和瞬时强度的统计分布。太阳、白炽灯、气体放电管等为热光源。

单模激光的一阶统计 first order statistics of single-mode laser 激光是由大量的原子或分子相关地受激辐射产生的，要讨论它的统计性质离不开它的产生机制。理想化的模型是纯单色光，$u(t)=S\cos(2\pi\nu_0 t-\varphi_0)$，由于激光的初始相位是由自发辐射驱动的，因而是一随机变量。它均匀分布在$(-\pi,\pi)$中，是一平稳和各态历经的随机过程。其统计特性不随时间变化，振幅的一阶统计可从特征函数求出。在$t=0$时，特征函数为

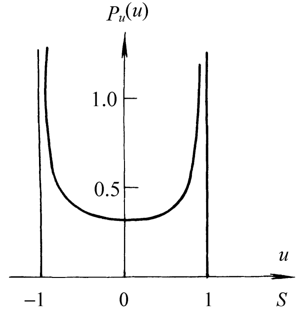
$$M_U(\omega)\equiv\exp(\mathrm{i}\omega S\cos\varphi)=\mathrm{J}_0(\omega S),$$

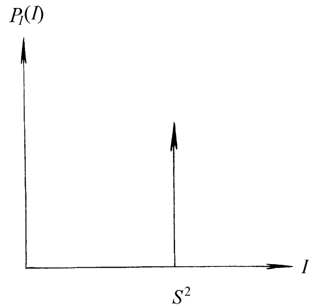
J_0为零阶贝塞尔函数。概率密度函数为特征函数的傅里叶逆变换，

$$P_u(u)=\begin{cases}\dfrac{1}{\pi\sqrt{S^2-u^2}}, & 当|u|\leqslant S\\ 0, & 其他\end{cases}$$

，强度概率分布实际上是一确定过程，即 $P_I(I)=\delta(I-S^2)$，可把激光场看做一组量子谐振子的辐射，如图所示。更实际的模型认为初相位随时间有一随机涨落，它来源于噪声驱动的振荡器固有的涨落和谐振腔终端镜面的无规振动。$u(t)=S\cos[2\pi\nu_0 t-\theta(t)]$，式中 $u(t)$的分布函数是复振幅平面上的环形 δ 函数，其振幅和强度的统计分布与上式相同。如果振幅也存在涨落时，其辐射光波具有以下形式：

$$u(t)=S\cos[2\pi\nu_0 t-\theta(t)]+u_n(t),$$





式中第一项为受激辐射，第二项代表一个小的剩余的自发辐射。$u_n(t)$为一微弱的噪声项，与$\theta(t)$统计独立无关，服从高斯统计。单模激光器工作在高于或低于阈值时光强度概率密度函数 $P_I(I)$为：

$$P_I(I)=\begin{cases}\dfrac{2}{\pi I_0}\dfrac{1}{1+\mathrm{erf}(W)}\cdot\exp\left[-\left(\dfrac{I}{\sqrt{\pi}I_0}-W\right)^2\right], & I\geqslant 0\\ 0, & I<0\end{cases}$$

式中 I_0为阈值的平均强度，代表一条峰值在 $W\sqrt{\pi}I_0$ 处的高斯分布曲线。激光器工作在远低于阈值处即

$W \ll 0, P_I(I) =$

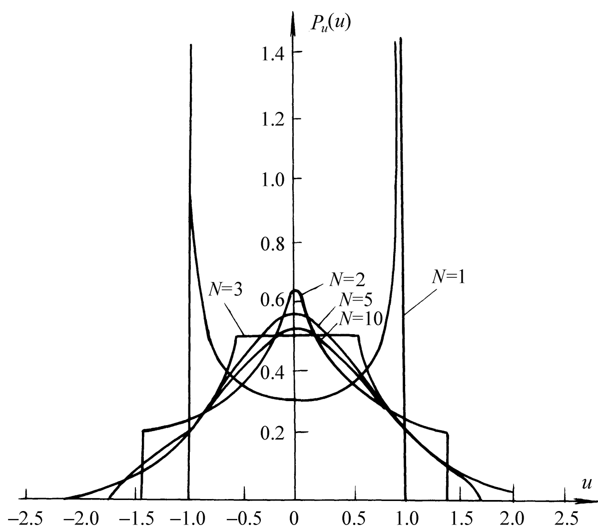
$$\begin{cases} \frac{2|W|}{\sqrt{\pi} I_0} \exp\left(-\frac{2|W|}{\sqrt{\pi} I_0} I\right), I \geqslant 0 \\ 0, I < 0 \end{cases}$$

$P_I(I)$如同热光一样近似为负指数分布。当激光器工作在阈值时，$W = 0$，$P_I(I) = \begin{cases} \frac{2}{\pi I_0} \exp\left(-\frac{I^2}{\pi I_0^2}\right), I \geqslant 0 \\ 0, I < 0 \end{cases}$，$P_I(I)$为半边高斯曲线。当激光器工作在远高于阈值处，$W \gg 0$，$\mathrm{erf}(W) \approx 1$，则$P_I(I)$是中心在$W\sqrt{\pi} I_0$的高斯分布：

$$P_I(I) = \begin{cases} \frac{1}{\pi I_0} \exp\left[-\frac{(1 - W\sqrt{\pi} I_0)}{\pi I_0^2}\right], I \geqslant 0 \\ 0, I < 0 \end{cases}$$

以上是讨论单模振荡情况。

多模激光一阶统计　first order statistics of multimode laser　对激光器工作在多模下振荡，其稳态输出为$u(t) = \sum_{i=1}^{N} S_i \cos[2\pi \nu_i t - \theta_i(t)]$，式中$N$为模式总数，可引起各模式之间的耦合。如假定各模式间完全独立，可使问题得到简化。工作在刚刚高于阈值的气体激光器基本上符合这一条件，N个独立模的特征函数为$M(\omega) = \prod_{i=1}^{N} J_0(\omega S_i)$，对上式作傅里叶变换可求出$P_u(u)$，只能求出数值解。图示多模激光，当$N > 5$时与热光统计性质上几乎相同。



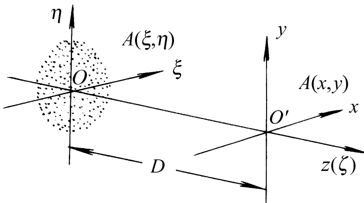
激光散斑效应　speckle effect of laser　当相干光照射到光学粗糙表面（即平均起伏大于波长数量级的表面）时，由于表面上大量不规则面元散射的子波相干叠加的结果，形成的反射光场或透射光场具有随机的空间光强分布，呈现颗粒状的结构称为散斑效应。散斑场可作为信息载体而广泛应用于干涉计量，图像处理，位移测量，振动分析等领域。

散斑效应一阶统计特性　first order statistical character of speckle effect of laser　设平面偏振的单色光入射在散射表面上，且散射时偏振态没有变化，因此可看做标量场，并具有形式：$u(x, y, t) = u(x, y)\exp(\mathrm{i}2\pi\nu t)$。我们观察的量为光强的时间平均值，假设（1）散射平面上

有 r 个散射元，且不同散射元之间相互独立统计；(2)散射表面随机高度和反射系数之间不存在任何联系，使散射元的振幅和相位独立统计；(3)设散射元的相位在区间$(0,2\pi)$均匀分布。则强度概率分布为：

$$P_I(I)=\begin{cases}\dfrac{1}{\bar{I}}\exp\left(-\dfrac{I}{\bar{I}}\right), & I\geqslant 0\\ 0, & \text{其他}\end{cases},$$

与热光的一阶统计完全相同。标准差等于平均光强，即 $\sigma_I=\bar{I}$。反差 $C=1$，可以看出散斑场是高反差的。



散斑效应二阶统计特性 second order statistical character of speckle effect of laser 二阶统计特性描述观察平面上两点光强关联情况表征了散斑场的空间结构或颗粒度。我们定义光强功率谱又称维纳谱 $W(f_x,f_y)$为：

$$W(f_x,f_y)=\left|\iint_{-\infty}^{\infty}I(x,y)\cdot\exp[-\mathrm{i}2\pi(f_x x+f_y y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right|^2,$$

它等于光强自相关函数的傅里叶变换，

$$W(f_x,f_y)=\iint_{-\infty}^{\infty}C_I(x,y)\cdot\exp[-\mathrm{i}2\pi(f_x x+f_y y)]\mathrm{d}x\mathrm{d}y,$$

式中 $C_I(x,y)$为光强自相关函数，可以看出维纳谱是散射面上强度分布的自相关。

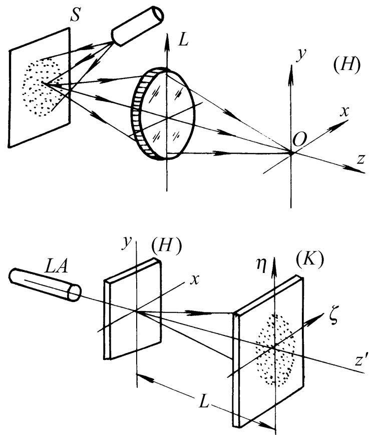
通过一维测不准关系来估算散斑的横向尺度，即颗粒度。$\Delta C_I=\dfrac{1}{\Delta W}$，式中 ΔC_I 为散斑的空域宽度，ΔW 为频域宽度，可作为散斑颗粒度或横向尺寸的度量。

位移散斑 speckle pattern of movement 散射面 S 被扩束的激光照射，透镜 L 将 S 成像在屏 H 上，其光强分布为 $D(x,y)$。在 H 面上放置记录介质进行二次曝光，其间表面 S 发生位移或变形，经处理后的记录介质透射率可表示为

$$t(x,y)=a-bD(x,y)*[\delta(x,y)+\delta(x+\Delta x,y+\Delta y)],$$

已记录了位移的信息。

用细激光束垂直照射二次曝光散斑图 H，在相距为 L 处平行放置屏 K。当 L 比激光光斑大得多时，在 K 上将出现被照明部分的傅里叶变换，屏上的图形为杨氏条纹一次曝光散斑晕 $\bar{D}$ 所调制，条纹周期 δ 与位移 $d=\sqrt{\Delta x^2+\Delta y^2}$ 的关系为：$d=\dfrac{\lambda L}{\delta}$，位移的方向与杨氏条纹正交。进行对物体表面内位移的测量，可进一步引申到应变应力场、距离和速度的测量。



光噪声 light noise 噪声是指对于某一物理量的理想值或其期望值的随机偏离。一个光学系统的结构可分为三个部分：输入端 O(物信号或光信息源)，交换系统 S 和输出端 D，此外还存在传输媒质。光学信息系统的噪声来自上述几个部分。

由于实际光源的发光机理是遵守统计规律，对输入端的物，不论是自发光或其他光源照射下反射光或透射光，由它的任一面元射出的瞬时光强作无规则起伏，因此物的瞬时强度不是理想的信号。探测器的时间响应有一定的宽度，在宽度内对光强的瞬时起伏作了时间平均；探测器的入窗有一定的面积，在此面积内

对光子的分布作了空间的平均。对不太弱的物光,可认为输入的是理想的信号。但对天文和航天观察中会遇到极其微弱的光信号源,已无法决定理想的信号。变换系统 S 是由透镜、棱镜等组成常规的光学系统,一般不产生噪声。

当输出端是由光电探测器接收时必须考虑各种光电转换器的散粒噪声和热噪声。如用感光胶片作为记录介质,将存在颗粒噪声。传输媒质往往是空气,由于湍流其折射率存在局部的无规起伏,使得系统的点扩展函数成为时间的随机过程而引入噪声。

如采用相干光作为照明光源,因其具有很高的空间相干性,光波在漫射表面上反射或透过一漫射板时就会产生斑纹,对成像面而言就是斑纹噪声。记录和检测装置还不免接收到杂散光,构成背景噪声。

从噪声与信号的关系区分,如噪声是一个与信号无关的独立随机过程,则称此噪声为加性噪声;如噪声与信号成正比,则称此噪声为乘性噪声;当噪声的功率谱为一常数时,称为白噪声。

散粒噪声(肖特基噪声) shot-noise　设一电子于时刻 t_k 从光阴极发射,这个基元电流的持续时间是从 t_k 到 $(t_k+\tau)$,则

$$i_k(t)=\begin{cases}\dfrac{\nu}{d}e, & t_k\leqslant t< t_k+\dfrac{d}{\nu};\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

式中 d 为光阴极到阳极的距离,并令 $\tau=\dfrac{d}{\nu}$。

散粒噪声是由大量的基元电流 $i_k(t)$ 所构成的随机过程,因电子的发射服从泊松分布,散粒噪声是服从泊松分布的一系列 δ 函数。可以证明信噪比与光电子发射的平方根成正比,也与电子到达阳极所需的时间平方根成正比。在一般光电器件中 τ 很小,可认为 $i(t)$ 的功率谱为一常数,所以说散粒噪声近似为白噪声。

热噪声 thermo-noise　热噪声是导体中自由电子的无规热运动引起的。考虑一电子在相继两次碰撞之间的自由飞行过程看做一个基元事件,对回路中电流基元贡献为:

$$i_k(t)=\begin{cases}\dfrac{\nu}{d}e, & t_k\leqslant t< t_k+\tau_k\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$$

由于各个基元事件是独立的,由中心极限定理得知,总的随机电流 $i(t)$ 应为正态分布。$i(t)$ 的方差为:$\sigma_i^2=\dfrac{4k}{R}T$,式中 k 为玻尔兹曼常数,T 为导体的绝对温度。我们可以说对给定的导体,热噪声只与温度有关,而与信号 $\bar{i}$ 无关,所以热噪声是一典型的加性噪声,也非常近似白噪声。

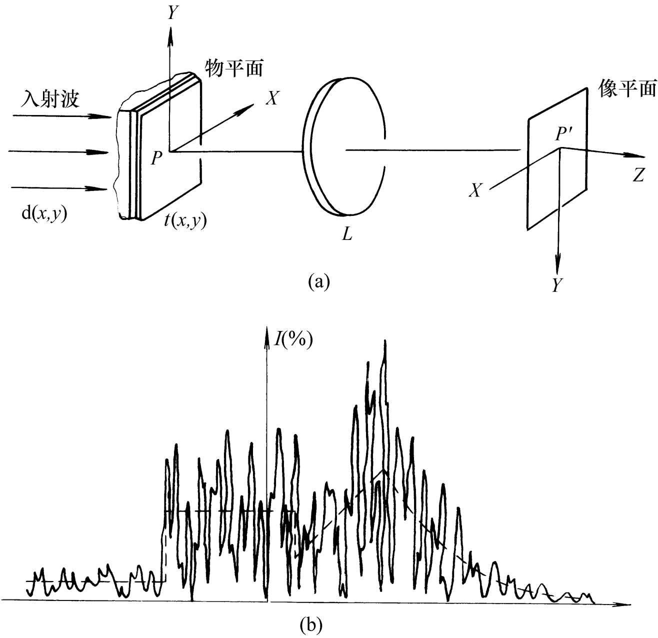
斑纹噪声 speckle noise　设一物的透射函数为:$f(r)=t(r)d(r)$,式中 $t(r)$ 为一理想物信号,$d(r)$ 为一典型的随机相位,概率密度为:$p(\varphi)=\begin{cases}\dfrac{1}{2\pi}, & -\pi<\varphi\leqslant\pi,\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$。如下页图(a)当用相干光照射物板时,形成有斑纹的像,设系统的点扩展函数为 $h(r)$,且与 $d(r)$ 无关,像面上波场为:$g(r)=f(r)\otimes h(r)\equiv\int_{-\infty}^{\infty}f(r')h(r-r')\mathrm{d}r'$,$d(r)$ 的自相关函数为:$\Gamma_{dd}(r_1,r_2)=\delta(r_1-r_2)$,$f(r)$ 的自相关函数为:$\Gamma_{ff}(r_1-r_2)=\begin{cases}|t(r_1)|^2, & r_2=r_1\\ 0, & \text{其他}\end{cases}$,而 $g(r)$ 的自相关函数为:$\Gamma_{gg}(r_1,r_2)=\int_{-\infty}^{\infty}|t(r')|^2h(r_1-r')^*h(r_2-r')\cdot\mathrm{d}r'$,即像面上 r 点光强的期望值。因 $\overline{I(r)}=\Gamma_{gg}(r,r)$,所以 $\overline{I(r)}=|t(r)|^2\otimes|h(r)|^2$,$|h(r)|^2$ 是非相干光照射下系统的光强的点扩展函数,所以上式为非相干光照射下的光强分布,记为 $I_{\mathrm{inc}}(r)$,则上式为:

$$I_{\mathrm{inc}}(r)=|t(r)|^2\otimes|h(r)|^2。$$

可证明像面上随机光强 $I(r)$ 的方差为:

$$\sigma_I^2(r)=\overline{I^2(r)}-[\overline{I(r)}]^2$$
$$=I_{\mathrm{inc}}^2(r),$$

斑纹噪声的标准偏差与期望值 I_{inc} 相等如下页图(b)所示。用相干光照明时,由于斑纹的存在,成像质量显著变坏。



期望像与斑纹像示意图

光纤的模式噪声　modal noise in the optical fiber　在光纤出射端面上呈现随时间作急剧变化的斑纹，它是由于在光纤内传播着多模造成的。这种随机变化将导致噪声，称为模式噪声，这是一种新型的噪声。当以相干光入射光纤的一端面时，从光纤另一端面出射的各个模式的波之间是相干的，在出射端面形成干涉光场分布。由于光纤甚长，参量的微小变化将导致不同的模式之间形成互不相同的随机相位差异，从而所有模式共同生成一种斑纹场，随时间作无规的变化。

将面域 S 取为以 O 点为中心、以 r 为半径的圆面，对于圆对称的光纤，当所有的模式以相等程度被激发时，光强的均值为

$$\langle I(r)\rangle=\langle I(o)\rangle\frac{n^2(r)-n^2(a)}{n^2(o)-n^2(a)},$$

式中 $I(o)$为芯心处的光强。在面元与斑纹场的自相关面积相等时，可以认为面元间是相互独立的。自相关面积的半径 $R(r)$与 r 的关系为

$$R(r)=R(o)\sqrt{\frac{n^2(o)-n^2(a)}{n^2(r)-n^2(a)}},$$

其中 $R(o)$是芯子轴心处斑纹的自相关面积半径。在不同的环域中的独立数目应为：$\mathrm{d}m(r)=\frac{2r}{R^2(r)}\mathrm{d}r$，斑纹亮斑的平均面积为 $\pi R^2(r)$，则

$$\mathrm{d}\langle P_{总}(r)\rangle=\pi R^2(r)\langle I(r)\rangle\mathrm{d}m(r)$$
$$=2\pi r\langle I(o)\rangle\frac{n^2(r)-n^2(a)}{n^2(o)-n^2(a)}\mathrm{d}u$$

所以信号 $P_{总}$ 为

$$\langle P_{总}(r)\rangle=2\pi\int_0^r u\langle I(o)\rangle\cdot\frac{n^2(u)-n^2(a)}{n^2(o)-n^2(a)}\mathrm{d}u$$

其均方根噪声

$$\sigma^2[P_{总}(r)]=\pi^2\int_0^r uR^2(o)\cdot[\langle I(o)\rangle]^2\frac{n^2(u)-n^2(a)}{n^2(o)-n^2(a)}\mathrm{d}u$$

由于被积函数中含有$[\langle I(o)\rangle]^2$，所以模式噪声近似为乘性噪声。若探测器的孔径为圆面域 S 则读出的信噪比为：

$$\mathrm{SNR}(r)=\frac{\langle P_{总}(r)\rangle}{\sigma[P_{总}(r)]}=V\sqrt{\frac{r^2}{2a^2}-\frac{(r/a)^{\alpha+2}}{a+2}},$$

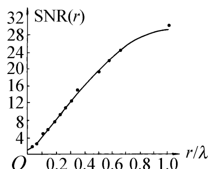
式中

$$V=ak\sqrt{n^2(o)-n^2(a)},$$

光纤的折率轮廓函数为：

$$n(r)=n(o)\sqrt{1-2b\left[\frac{r}{a}\right]^2}.$$

从信噪比理论值与实验比较的图中获得证实。



统计图像的恢复 statistical image recover 物图像函数为 $f(x,y)$，经系统 S 后成像 $g(x',y')$，在成像时加进了噪声 $n(x',y')$。系统的性质可用点扩展数 $h(x,y;x',y')$来表示。如果 $h(x,y;x',y')=h(x-x',y-y')$，则称 S 为空间不变系统。系统的成像过程可表为：

$$g(x',y')=f(x,y)\otimes h(x,y)+n(x',y')$$

借助计算机进行计算时，需进行离散化，

$$f=\begin{bmatrix}f_1\\f_2\\\vdots\\f_L\end{bmatrix},g=\begin{bmatrix}g_1\\g_2\\\vdots\\g_M\end{bmatrix},n=\begin{bmatrix}n_1\\n_2\\\vdots\\n_M\end{bmatrix},$$

$$H=\begin{bmatrix}h_{11},h_{12},\cdots,h_{1M}\\h_{21},h_{22},\cdots,h_{2M}\\\vdots\qquad\qquad\vdots\\h_{L1},h_{L2},\cdots,h_{LM}\end{bmatrix}$$

则写成矩阵形式为：

$$g=Hf+n。$$

所谓图像的恢复，是对已知的 H 和 n，由 g 来推断 f。推断出来的 f 称为 f 的估值，记为 $\hat{f}$，因噪声 n 是随机的，推断的 f 也是随机的。图像的恢复问题实质上是求统计估值和推断问题，这里需要一个准则来进行推断，由此引入不同的方法进行图像的恢复。如维纳滤波法，最大熵法，最大信息量法，最大概率法等。

维纳滤波 Wiener filter 设 $f_0(x,y)$为真实物，$g_0(x',y')$为真实像，有 $g_0=f_0\otimes h$，有噪声的像为 $g=g_0+n$，在频域空间有 $G=G_0+N$，用一待求的滤波函数 Φ 乘上 G，即 $G_\Phi=\Phi G=(G_0+N)\Phi$，使得滤波的像与理想像之间的均方差 $\varepsilon=\overline{\int|g_0-g_\Phi|^2\mathrm{d}r'}$ 为最小，从而可求得 $\Phi=\frac{W_0}{W_0+W_n}$。滤波的像为 $g_\Phi=F^{-1}[G_\Phi]$，这样的 Φ 对任一实测的 g，可得到最佳像的谱 G_Φ，进而得知最佳恢复物的谱，所以恢复物为 $\hat{f}_\Phi=F^{-1}\left[\frac{G_\Phi}{H}\right]$，式中 H 为系统脉冲响应函数 h 的傅氏变换。

利用傅氏变换的性质：$\int|g_0-g_\Phi|^2\mathrm{d}r'=\int|G_0-G_\Phi|^2\mathrm{d}\nu$，假定信号谱 G_0 与噪声谱 N 互不相关，即$\overline{G_0N}$积分项为零，设平均功率谱为：$W_0\equiv\overline{|G_0|^2}$，$W_n=\overline{|N|^2}$，理想的物的平均功率谱 W 为：$W=\overline{\left|\frac{G_0}{H}\right|^2}=\frac{W_0}{|H|^2}$，可得出恢复物的谱为：

$$\hat{F}(\nu)=\frac{W(\nu)H^*(\nu)}{W(\nu)|H(\nu)|^2+W_n(\nu)}G(\nu),$$

令$\frac{WH^*}{W|H|^2+W_n}=\Phi_W$，称 Φ_W 为维纳滤波函数。由于在频谱上乘一因子 Φ，都是线性运算，所以用滤波法恢复图像称为线性恢复。

最大熵法 method of maximum entropy 设一幅图像光强分布为 $f(x,y)$，它是由一份一份的元光能堆积起来，在经典概念下为一个个颗粒(小球)，且各颗粒是可以区分的。设一图像有 I 个像元，每个像元中含光颗粒为 $f_1,f_2,\cdots,f_I$，设系统无吸收，有 $\sum_{i=1}^{I}f_i=N$，图像中颗粒分布的方式数目为：$W_f=\frac{N!}{\prod_{i=1}^{I}f_i!}$，取 W_f 的

对数，且利用 Sterling 近公式，得 $\text{In } W_f = N\ln N - \sum_{i=1}^{I} f_i \ln f_i$。一个颗粒落在第 i 个像元上的概率为：$P_i = \frac{f_i}{N}$，即 f_i 与 p_i 成正比。我们把 $-\sum_{i=1}^{I} f_i \ln f_i$ 称为物图像的熵。W_f 可认为是图像的简并度，图像出现的可能性与简并度成正比。把简并度最大的图像作为最似然的恢复解即最大熵法。

若将噪声 n_{m} 也看做一幅“图像”，也是光颗粒数目的某种分布，也有简并度。将实测的像面分布 g_{m}，可认为由 f_i 分布和 n'_{m} 分布共同构成。由于物和噪声统计独立，联合出现的方式数为二者各自出现的方式数之乘积：$W = W_f W_n$，$\ln W = \ln W_f + \ln W_n \ln W$ 取极大就归结为求物和噪声的熵之和的最大值。宜用于有平缓背景的物图像的恢复。

Atomic and Molecular Physics
原子和分子物理学

一、原子物理学总论
General Introduction of Atomic Physics

原子物理学 atomic physics 研究原子的内部结构、相互作用及其运动规律的科学。它是物理学中研究物质结构的原子层次的分支学科。它在20世纪初开始形成，随着人们对原子有了越来越清楚的认识后才逐步发展起来的。原子物理学的主要研究内容是：原子的电子结构、原子光谱和原子之间或与其他物质之间的碰撞及相互作用。

20世纪初到30年代是原子物理学快速发展的时期，那时它处在物理学的前沿，原子物理学的发展为量子力学的建立奠定了重要基础。卢瑟福核式结构的原子模型和玻尔关于原子结构的假设就是其中的重要代表。量子力学建立后，成功地解决了当时遇到的一些原子物理问题，使人们认为原子运动的规律已经了解，不再把主要精力放在原子物理方面，原子物理学的发展走入低谷。20世纪50年代末期，由于空间技术和空间物理学发展的需要以及激光技术应用于原子物理学的研究大大提高实验精度的事实，原子物理学的研究重新进入活跃时期。

射频和微波波谱学的新实验方法推动了对原子能级精细结构的研究。原子碰撞的研究，相应地发展了离子束、电子束、粒子加速器、同步辐射加速器、激光器、各种能谱仪等仪器设备及相关的检测技术和理论计算方法。强激光与原子相互作用产生了饱和吸收及双光子、多光子吸收等现象，促使非线性光谱学发展成为非常活跃的研究领域。高温、高压、强场、低温等极端物理条件下和高激发态、高离化态等特殊状态下原子的结构和性质的研究也已成为原子物理学研究的重要领域。原子团簇，尤其是碳原子团簇，如C_{60}、碳纳米管等新型物质结构形态和材料的研究，以分子设计为目标的原子分子工程的研究均获得长足进展，方兴未艾。

原子是从宏观到微观的第一个层次，原子的结构和性质直接决定了宏观物质的属性，因此，原子物理学是很多重要学科的基础，处于很多学科的交汇点——原子层次上。这些学科包括凝聚态物理、表面科学、等离子体物理、大气物理、空间物理、天体物理、材料科学、环境科学、化学、生物学、医学等，以及依赖于原子物理学提供重要数据的技术科学，如空间技术、核技术、激光技术、核武器技术等。因此，原子物理学的研究和发展具有非常重要的科学价值和现实意义。

原子 atom 按照物质结构无限可分的认识，原子是组成化学元素的最小单元，是物质结构序列中的一个层次。

原子一词来源于希腊文“atomos”，是“不可分割的”意思。公元4世纪，古希腊物理学家德谟克利特(Democritus)提出这一概念，认为物质的结构是由不可再分的一些基本单元构成的。1808年，英国物理学家、化学家道尔顿(J. Dalton)提出原子是元素最小单元的概念，不同的元素有不同的原子。经过许多科学家努力，尤其是从实验上发现了电子和α粒子，逐步认识到原子是可分的。原子都是由带正电荷的原子核和核外带等量负电荷的电子构成的，呈电中性。各种原子的半径都在10^{-10}m数量级。各种原子的质量的数量级在10^{-27}～10^{-25}kg之间。原子的理化性质取决于它的结构和内部发生的过程。相同或不同原子的互相结合组成各种不同的分子。

原子学说 atomism 这是关于物质具有不连续结构的一种学说。随着物理学的发展，人们对物质结构的认识不断提高，原子学说也经历了从古代到现代的种种发展，典型的原子学说有如下几种：

古代的原子学说：公元前4世纪，古希腊物理学家德谟克利特最早提出物质是由许多最小单元的颗粒——“原子”构成的，而“原子”是不可分割的，永恒不变的。物质的多样性是由于原子的形式不同、所处状况的不同以及结合的方式不同而产生的。在我国，早在公元前400多年前的战国时期就出现了类似的观点，最著名的是墨家，《墨经》中记载：“端，体之无序最前者也”，“端是无同也”。意思是说，“端”(即原子的概念)是物体(“体”)的不可分割(“无序”)的最原始的东西(“最前者”)。由于“端”里没有共合(“无同”)的东西，所以不可分割。

机械决定论的原子学说：17世纪的欧洲，力学在自然科学中占统治地位，于是产生了机械决定论的原子学说，以牛顿(Newton)为代表。他认为，原子是球形的、有重量的微粒，可以机械地结合成较大的聚集体，原子遵从力学定律，原子之间具有与万有引力相类似的引力，原子的运动都是简单的机械位移产生的。这种机械决定论的原子学说不能解释光、电、热等物理现象及燃烧等化学过程，从而促使化学的原子学说的出现。

化学的原子学说：1803年道尔顿引入元素的相对原子量，1808年提出科学的原子学说：物质由不可分解的原子组成，在化学反应中原子性质不变，不同元素的原子不同，每种原子都有确定的原子量。1811年意大利物理学家阿伏伽德罗(A. Avogadro)提出分子假说，认为任何气体都是由“分子”组成的，而每个分子又是由两个或两个以上的“原子”组成的。后来，化学家们提出“原子价”的概念，并建立化学结构理论。1869年门捷列夫(Mendeleev)发现了元素周期律，揭示了化学元素的原子价与原子量之间的联系，准确地预言了一些具有某些特定性质的新元素的存在，使化学的原子学说获得很大的成功。

现代原子学说：19世纪末20世纪初，伦琴射线和放射性衰变现象的发现、电子的发现和电子电荷、电子质量的测定，使人们认识到原子不是不可分割的，原子的结构是复杂的，原子由电子和原子核组成，而原子核也是可分的，使原子学说冲破机械决定论的束缚，进入现代原子学说的时期。到现在为止，现代原子学说可以分为两个阶段。

卢瑟福原子模型和玻尔理论阶段：卢瑟福根据原子对α粒子的散射实验，提出原子的核式结构模型，导出的卢瑟福散射公式得到实验证实，说明卢瑟福的原子模型是正确的。1913年玻尔将普朗克(M. Planck)的量子概念和爱因斯坦(A. Einstein)的光子概念与原子的核式模型相结合，提出原子结构的新假设，认为原子的能量状态是不连续的，形成离散的能级，当原子的能量状态发生跃迁时，就发射出一定频率的光。玻尔理论能够说明氢原子光谱等某些原子现象，但还存在不少缺点，它仅是一种近似理论。

量子力学阶段：1924年德布罗意(de Broglie)提出微观粒子的波动性。1925年薛定谔(E. Schrödinger)与海森伯(W. Heisenberg)在此基础上分别建立了描述原子的波动力学和矩阵力学，这两种理论实质上是相同的，仅仅数学表现形式不同。这种理论后来发展成量子力学，可以完整地描述微观粒子体系的结构和运动规律，能够比以前更好地解释原子现象，但原子学说不会就此停止发展，随着新的实验现象的出现，现代原子学说必将继续向前发展。

元素周期律 periodic law of elements 1869年前后俄国化学家门捷列夫等人发现化学元素的物理和化学性质随着元素原子量的增加呈现周期性的变化，经过一定的间隔(周期)就出现相同的性质，这就是元素周期律，是重要的自然规律，是现代自然科学的基石之一。

元素周期律的现代定义是：化学元素的物理和化学性质是元素的原子序数的周期函数。即如果将元素按原子序数(即原子核电荷数或核外电子数)从小到大排列，元素的性质呈现周期性的变化，这是由于随着原子序数的增加，元素的原子结构出现了周期性变化。元素周期律是元素原子结构周期性变化的宏观反映。元素周期律的发现大大促进了对元素及其化合物性质的深入研究，促进了现代物质结构理论的建立和发展。

根据元素周期律，门捷列夫曾预言当时尚不

知道的一些元素（如钪、锗、镓等）的存在及其性质，后来都陆续发现，得到证实。

元素周期表 periodic table of elements 元素周期表是根据元素周期律，按照元素原子量由小到大顺序排列出来的化学元素分类表。首先由门捷列夫在1869年提出。元素周期表是元素性质周期律的生动反映：随着原子量的顺序增加，元素的性质出现周期性的重复。元素在元素周期表中位置的序号叫做原子序数，它除了表示元素在周期表中的排列次序，还表示中性原子的核外电子数，元素周期表是原子核外电子排列周期性的具体反映。

元素周期表有各种不同式样，常见的式样将化学元素横向分成七个周期，纵向分成九或十六个族。从左到右、从上向下按原子量从小到大顺序排列，同一族的元素有相似的物理和化学性质，这是由于这些原子的核外电子排布的格式是相似的，例如ⅦA族的氟（F）和氯（Cl）。氟的原子序数9，核外9个电子，分两层排列，第一、二层分别有2和7个电子；氯的原子序数17，核外17个电子，分三层排列，第一、二、三层分别有2、8、7个电子，最外层都是7个电子，因而它们有相似的性质。从第一到第七周期分别有2，8，8，18，18，32，……个电子。

元素周期表还有其他形式，如宝塔式，每一行元素属于一个周期，上下用直线或斜线连接的元素属于同一族。又如长式，比较易于说明原子结构和元素性质的关系，且使用比较方便。

原子序数 atomic number 指某原子所属化学元素在元素周期表中排列位置的序号，数值上等于该原子的原子核中质子数，或中性原子的核外电子数，通常记为 Z。同一元素可有各种不同原子，它们具有相同的原子序数和不同的质量数，称为同位素（见“原子核物理”部分“同位素”）。原子序数在1920年通过实验测量得到证实。原子序数是重要的物理常数之一。原子序数通常记在元素符号的左下角，如$_{1}H$，$_{92}U$ 等。

原子质量数 atomic mass number 指一个原子的原子核中含有的质子和中子的总数，通常记为 A，写在化学元素符号的左上角，简称质量数，如^{12}C 表示质量数为12的碳原子。

自然界中的碳含有三种质量数不同而核中电荷相同的碳原子：^{12}C、^{13}C、^{14}C，它们的原子核中都含有6个（等于原子序数）质子，而含有的中子数 $N=A-Z$，分别为6、7、8。^{12}C、^{13}C、^{14}C称为碳同位素。若以碳单位为原子质量单位（见“原子质量单位”）u，它们的原子质量分别为12.000000，13.008665，14.017330，取其整数，恰好等于各自的原子质量数，这是原子质量数的另一种定义。

原子质量单位 atomic mass unit 为原子物理学中普遍使用的质量单位，其定义为原子质量数为12的碳原子^{12}C 质量的1/12，称为碳单位，记为 u，$1u=1.6605402\times10^{-27}$kg，用来计量原子、分子和各种基本粒子（如质子、中子、电子、介子等）的质量，譬如：电子的质量为 9.1093897×10^{-31}kg $=5.4857990\times10^{-4}$u。氧分子的质量为 5.3135294×10^{-26} kg $=31.9988$u。

原子量 atomic weight 原子量有两种：原子原子量和元素原子量。原子原子量是原子以碳单位为质量单位（见“原子质量单位”）量度的原子质量，是一种相对质量。如^{12}C 原子的原子量为12.000000，^{13}C 原子的原子量为13.008665。而通常所说的化学元素的原子量是指该元素在自然界存在的同位素混合物的平均原子量，跟混合物中各成分的占有率直接有关。元素原子量的计算公式为：元素原子量 $=\sum_{i=1}^{r}\lambda_i m_i$，其中 m_i，λ_i 分别为第 i 种同位素的原子量和它在混合物中的占有率，r 为同位素的种数。如自然界的碳，是三种同位素^{12}C、^{13}C、^{14}C 的混合物，分别占98.892%，1.108%，12×10^{-10}%，因此，碳元素的原子量是 $12\times98.892\%+13\times1.108\%=12.011$，而不是整数12，这就是元素周期表中列出的碳原子量。若某元素没有天然同位素，则该元素原子量就是该原子的原子质量（以碳单位为质量单位）。如钠原子只有一种^{23}Na，则钠元素的原子量就是钠原子的原子量22.98977。

1962年以前物理学中曾经用^{16}O 原子质量的1/16作为物理学中原子质量单位，这是物

理学中的氧单位。而在化学中仍采用天然同位素混合物(由^{16}O和微量的^{17}O、^{18}O组成)的平均质量的1/16为化学中原子质量单位,称为化学中的氧单位(即1.6734×10^{-27}kg),这是对原子质量的两种标度。按照化学标度,氧元素的原子量为整数16,而按照物理标度,则为16.004462。自然界中氧的同位素组成,在海水中与在空气和岩石中不一样,因此氧单位的化学标度不够严格。从1962年起物理学和化学统一用碳单位为原子质量单位,解决了物理学和化学中标度不一致的问题。采用碳单位还有其他好处,如可用质谱仪测量质量,准确度很高;碳能生成很多种含碳原子的分子、离子,便于用质谱仪测量,将^{12}C和很多元素的离子的质量进行精确比较,从而确定其原子量;用^{12}C为标准,对原来的原子量的修正值也不大。

"原子量"现已更名为"相对原子质量"。

原子质量 atomic mass 指整个中性原子的质量,为原子核质量与等电量的核外电子质量之和,在国际单位制中以千克(kg)为质量单位。由于电子质量仅为质子质量的1/1820或中子质量的1/1839,原子质量主要取决于原子核中质子和中子的质量和,它随原子核中质子和中子的总数(即原子质量数)增加而增大。化学元素的原子质量 $m_a = m\text{u} = m\times1.6605402\times10^{-27}$kg。其中 m 为元素原子量,u为碳单位(见"原子质量单位"词条)。可见元素的原子质量跟元素原子量成正比。氢原子^{1}H由一个质子和一个电子构成,质量最小,为1.67×10^{-27}kg,而超铀原子的质量可以大到4.18×10^{-25}kg。利用质谱仪可以精确测量各种原子的原子质量。

原子质量换算因素 atomic mass conversion factor 指物理学中原子质量单位与化学中原子质量单位的比值。当用氧单位作为原子质量单位时,由于物理学中的氧单位与化学中的氧单位不一致,因此,原子质量换算因素为16.004462/16=1.0002789(见"原子量")。当物理学与化学中统一使用碳单位u(^{12}C原子质量的1/12,即$\text{u}=1.6605402\times10^{-27}$kg)为原子质量单位时,原子质量换算因素为1。

摩尔 mol 国际单位制中一种计量物质的量的单位。摩尔可用于原子、分子、离子、电子等各种粒子及其组合体。^{12}C原子的质量为12u,其中u为原子质量的碳单位(见"原子质量单位")。12g^{12}C中含有的原子数 $N_A=12\times10^{-3}\text{kg}/12\text{u}=6.0221367\times10^{23}$。常数 N_A 称为阿伏伽德罗常量。通常把含有原子数为 N_A 的^{12}C定义为1摩尔^{12}C原子。类似地,可推广到其他元素的原子及分子、离子、电子等各种粒子及其组合体。1摩尔某物质定义为含有其基本结构的粒子数目为 $N_A=6.0221367\times10^{23}$ 的该物质。

12为^{12}C原子的原子量,1摩尔^{12}C原子的质量是12g。类似地可以证明,对于其他种类的原子,若该种原子的原子(或元素)原子量为 m,则1摩尔该种原子的质量为 mg,含有的原子数为 N_A。摩尔原子过去称为克原子,表示一定质量的某种同位素或元素,以克为单位,其数量等于该种同位素或元素的原子量。如同位素^{14}C的原子量是14,1摩尔原子^{14}C的质量为14g。碳元素的原子量是12.011,则1摩尔原子碳元素的质量为12.011g。类似地,也可定义摩尔分子,过去称为克分子,表示一定质量的某种物质,以克为单位,其数量等于该物质的分子量,其中含有的分子数为 N_A。

阿伏伽德罗常量 Avogadro constant, Avogadro number 也称"阿伏伽德罗数",简称"阿氏数"。为1摩尔原子的任何元素所含有的原子数(见"摩尔"),用符号 N_A 表示,它的数值与原子质量单位的选取有关,$N_A=10^{-3}\text{kg}/\text{u}$,u为以千克表示的原子质量单位,现在均以$^{12}C$做标准($\text{u}=1.6605402\times10^{-27}$ kg),$N_A=6.0221367\times10^{23}/\text{mol}$。过去以$^{16}O$做标准时,($\text{u}=1.659828\times10^{-27}$kg),$N_A=6.02472\times10^{23}/\text{mol}$(见"原子质量单位"、"原子量"词条)。常量 N_A 是以意大利物理学家阿伏伽德罗的名字命名的。kg是宏观质量单位,u是微观质量单位,N_A 起的作用正是沟通宏观、微观之间的桥梁作用。

阿伏伽德罗定律 Avogadro law 1811年意大利物理学家阿伏伽德罗提出一个假设:等温

等压条件下,体积相同的任何气体含有的分子数相同。后来被称为阿伏伽德罗定律。由于1mol分子的任何气体含有同样的分子数,阿伏伽德罗定律可以改述为:等温等压条件下,1mol分子的任何气体所占的体积都相同。当在温度0℃,压强一个大气压下,1mol分子的任何气体的体积都是22.41410升。可以根据气体分子运动论导出阿伏伽德罗定律。

原子体积 atomic volume 指1摩尔原子的元素在固体状态下的体积,记为 V_0。$V_0=m/\rho$,其中 m 为元素的原子量,ρ 为元素在固态下的密度。如果仅仅估算,可用原子质量数 A 代替原子量 m。例如,对铝 ^{27}Al,$A=27$,$\rho=2.7\mathrm{g/cm^3}$,$V_0=1.0\times10^{-5}\mathrm{m^3}$;对 ^{63}Cu,$A=63$,$\rho=8.9\mathrm{g/cm^3}$,$V_0=7.1\times10^{-6}\mathrm{m^3}$。

原子半径 atomic radius 对固态元素,可从原子体积 V_0 来估算原子半径。假设单个原子是球形,其体积为 $\frac{4}{3}\pi r^3$,r 为原子半径,N_A(阿伏伽德罗常量)个原子的体积为 V_0,所以,原子半径 $r=\sqrt[3]{\frac{3V_0}{4\pi N_A}}=\sqrt[3]{\frac{3A}{4\pi\rho N_A}}$,其中 A 为原子质量数,ρ 为固态元素密度。例如铝 ^{27}Al 的 $r=1.6$Å,铜 ^{63}Cu 的 $r=1.4$Å,铅 ^{207}Pb 的 $r=1.9$Å。其中长度单位:Å(埃)$=10^{-10}$m。可见,不同质量的原子,其半径都差不多。

对于气态元素,原子半径可以从平均自由程 λ 的公式中得出:$\lambda=\frac{1}{\sqrt{2}\pi d^2 n}\cdot\frac{1}{1+\frac{c}{T}}$,其中 n 为每立方厘米中的原子数,c 是常数,T 是绝对温度。还可以通过范德瓦尔斯方程中的常量 b 或其他方法求得,也可从实验中测得。但所得结果,原子半径的数量级均在 10^{-10}m。

原子有序化 atomic ordering 晶体中原子或离子都是按一定规则周期排列起来的称之为原子有序化。

原子频率 atomic frequencies 指晶格中原子的固有振动频率。

原子阻止本领 atomic stopping power 当带电粒子通过吸收体时,由于使吸收体原子电离,从而损失能量。所谓原子阻止本领是指单一元素组成的吸收体的原子使带电的 α 和 β 粒子减速的能力(与空气作比较)。通常用带电粒子通过单位长度损失的能量来表示原子阻止本领,其数学表示式是 $-\mathrm{d}E/\mathrm{d}x$,其中 E 是带电粒子的能量,x 是带电粒子在吸收体中走的距离。单位为兆电子伏/厘米(MeV/cm)。

原子常数 atomic constant 泛指研究原子的结构和性质时用到的基本物理常数,即原子物理学中出现的基本物理常数,并无准确的定义。譬如,阿伏伽德罗常量 N_A,原子质量单位u,电子电荷 e,玻尔半径 a_0,普朗克常数 h,电子荷质比 e/m_e,精细结构常数 a,里德伯常数 R,斯忒藩-玻尔兹曼常数 σ 等。常用的原子常数的数值见附录“原子物理学基本常数”。

原子单位 atomic unit 这是理论物理中应用的一种单位制,记为(a.u.),原子物理中有时也用。取电子电荷 $e=1$,电子质量 $m_e=1$,有理化的普朗克常数 $\hbar=\frac{h}{2\pi}=1$ 为最基本量。下面列出原子单位制中常用单位的定义以及它们在国际单位制中的表示式和数值。取普朗克常数 $\hbar=1.05457266\times10^{-34}\mathrm{J\cdot s}$,真空介电常数 $\varepsilon_0=8.854187817\times10^{-12}\mathrm{A\cdot s/(V\cdot m)}$。欲从原子单位制转换到其他单位制,只需将普适常数 e、m_e、$\hbar$ 在该单位制中的数值代入即可,它们就是单位制间的转换因子。

1. 电荷单位:电子电荷 $e=1.60217733\times10^{-19}$C。

2. 质量单位:电子质量 $m_e=9.1093897\times10^{-31}$kg。

3. 长度单位:第一玻尔轨道半径 $a_0=4\pi\varepsilon_0\hbar^2/m_e e^2=5.29177249\times10^{-11}$m。

4. 速度单位:第一玻尔轨道上的电子速度

$v_0=\hbar/a_0 m_e=e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar=2.18769416\times10^6$m/s。

5. 动量单位:第一玻尔轨道上的电子动量

$p_0=m_e v_0=\hbar/a_0=m_e e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar=1.99285336\times10^{-24}\mathrm{kg\cdot m/s}$。

6. 能量单位:氢原子电离能的二倍 $=e^2/4\pi\varepsilon_0 a_0=m_e e^4/(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2=p_0^2/m_e=4.35974819\times10^{-18}$J。

7. 时间单位:$a_0/v_0=(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3/m_e e^4=2.41888129\times10^{-17}$s。

8. 频率单位：$v_0/a_0 = m_e e^4/(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3 = 4.13414251\times10^{16}s^{-1}$。

9. 电势单位：$e/4\pi\varepsilon_0 a_0 = m_e e^3/(4\pi\varepsilon_0\hbar)^2 = 27.2113961V = 9.07674471\times10^{-2}$静电系电势单位。

10. 电场强度单位：$e/4\pi\varepsilon_0 a_0^2 = m_e^2 e^5/(4\pi\varepsilon_0)^3\hbar^4 = 5.14220824\times10^9V/cm = 1.71525604\times10^7$静电系电势单位/厘米。

11. 磁感应强度单位：$m_e^2 e^3/(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^3 = 2.3505181\times10^5T = 2.3505181\times10^9G$。

原子核 atomic nucleus　为原子的核心部分，由质子和中子(统称核子)组成，它集中了几乎是原子的全部质量。核子间通过核力结合在一起。核内质子数等于元素周期表中该元素的原子序数 Z。核内核子总数等于原子质量数 A，因此核内中子数 $N=A-Z$。单个质子带正电 $+e$，原子核带正电 $+Ze$，$e=1.60217733\times10^{-19}C$。原子核的线度约为 $10^{-15}\sim10^{-14}m$，不足原子半径($\sim10^{-10}m$)的万分之一。原子核的质量 M 为核内所有质子和中子质量之和。原子核的最大体密度可达 $10^{17}kg/m^3$。原子核有自旋，记为 I。

原子实 atomic kernel　原子中最外层的电子(价电子)很容易脱离原子，去掉价电子的原子称为原子实，它是由除价电子外的内层电子加上原子核构成的。内层电子围绕原子核运动，不易脱离，因此，原子实是一个非常牢固的系统，它是由原子形成的一种正离子。

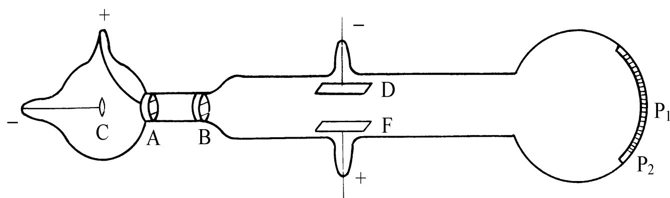
电子 electron　电子是一种带负电荷的稳定的基本粒子。一切原子都是由原子核和绕核运动的若干电子组成。1897 年英国物理学家汤姆孙(J.J.Thomson)在研究阴极射线时首先发现电子。电子的电量为 $e=1.60217733\times10^{-19}C$，电子的静止质量 $m_e=9.1093897\times10^{-31}kg$。当电子的运动速度很高时，必须考虑电子质量随速度增高而增大，它遵从爱因斯坦公式：$m=m_e/\sqrt{1-v^2/c^2}$，其中 c 为光速，v、m_e 为电子的速度和静止质量。电子有自旋运动，具有自旋角动量和自旋磁矩。电子既具有粒子性又具有波动性。

过去曾认为 e 是最小电量，后来确认夸克是更基本的物质单元，其带的电量仅为 e 的 1/3 或 2/3，称为分数电荷。

电子属基本粒子中的轻子类，它与其他粒子的相互作用为电磁相互作用和弱相互作用。电子的定向运动形成电流，利用电磁场可以控制电子的运动，做成各种电子元器件，推动了工业的革命、科技和经济的发展，今后还将深刻地影响人类的社会生活。

电子经典半径 electron classical radius　把电子看做小圆球，根据经典理论(电子的电势能等于电子的静能 $m_e c^2$)导出的球半径 $r_e = e^2/4\pi\varepsilon_0 m_e c^2 = 2.81794092\times10^{-15}m$，称为电子经典半径，它不能较好地反映电子的实际线度，仅是电子半径的上限。现代物理学的研究表明，电子半径 $<10^{-18}m$。

汤姆孙实验 Thomson experiment　这是 1897 年英国物理学家汤姆孙(J.J.Thomson)研究阴极射线的实验，从实验上确认电子的存在，并测出电子的荷质比 e/m_e。实验装置示意图如下。



阴极射线从放电管的阴极 C 发出,通过狭缝 A、B 成一狭窄的射线,从平行的金属平板 D、F 间穿过,到达荧光屏上 P_1 点,加电场 $\boldsymbol{E}$(F 为正极),射线向正极偏转,到达 P_2 点,可知阴极射线带负电,假设阴极射线是由电荷为 $-e$、质量为 m_e 的粒子组成的。放电管周围加一垂直于纸面的磁场 $\boldsymbol{H}$,使射线粒子受到的磁场力 Hev 与电场力 Ee 相互抵消,射线从 P_2 点返回 P_1 点,从而定出射线粒子的速度 $v=E/H$。去掉电场,射线在垂直磁场作用下画圆形轨迹(半径为 r)。射线粒子受到的离心力 $m_e v^2/r$ 与磁场力相平衡,从而得到射线粒子(即电子)的荷质比 $e/m_e=E/H^2r$,测出 E、H 和 r,就得到电子的荷质比。

电子荷质比 charge-mass ratio of electron 指电子的电荷 e 与质量 m 的比值 e/m。1897 年汤姆孙实验测得的电子荷质比叫静荷质比,因为实验装置中电子的速度远小于真空光速 c。电子静荷质比的精确值是 $e/m_e=1.75881962\times10^{11}$C/kg。

1901 年考夫曼(S.G.Kaufmann)对 β 射线荷质比的测定发现构成 β 射线的电子的荷质比与速度大小有关,$e/m=(e/m_e)\sqrt{1-(v^2/c^2)}$,$v$ 是 β 电子的速度,m 是 β 电子速度为 v 时的质量,m_e 是 β 电子的静止质量。β 射线的电子的速度可达光速的 90% 左右,所以 β 电子的荷质比 e/m 可小到其静止值 e/m_e 的 1/2 左右。

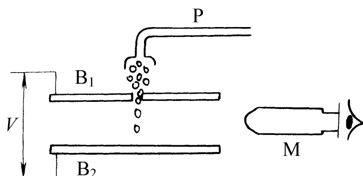
从考夫曼实验结果中消去电子电荷 e,得到 $m=m_e\sqrt{1-(v^2/c^2)}$,这正是相对论中爱因斯坦公式 $m=m_0\sqrt{1-(v^2/c^2)}$(m_0 为物质的静止质量),它表明物质的质量随其速度增大而增大,这就是电子荷质比 e/m 随速度增大而减小的原因。

电子电荷 electron charge 见“密立根油滴实验”和“电子”。

电子质量 electron mass 见“电子荷质比”和“密立根油滴实验”。

利用“考夫曼实验”和“密立根油滴实验”分别测得的电子静荷质比 e/m_e 和电子电荷 e,可求得电子静止质量,其现代值为 $m_e=9.1093897\times10^{-31}$kg,同时求得电子速度为 v 时的电子质量 $m=m_e\sqrt{1-(v^2/c^2)}$,这正是爱因斯坦质量公式,当电子的速度很高时,必须用此公式,随着电子速度 v 的增大,电子质量 m 相应增大。

密立根油滴实验 Millikan oil-drop experiment 这是著名的精确测量电子电荷的实验,由美国物理学家密立根(R. A. Millikan)在 1910 年完成。实验装置示意图如下。



平板 B_1、B_2 水平放置构成平行板电容器,上极板 B_1 的中央开有小孔。P 为喷雾器,喷出的小油滴通过小孔进入电容器。在油滴形成过程中使其带电,并用 X 射线照射等方法改变其电量。在极板 B_1、B_2 间加上一定电压 V 形成匀强电场,油滴进入电容器后在重力、电场力、空气浮力和黏滞阻力作用下最后变成匀速运动,其速度值可用显微镜 M 观察通过已知距离的时间来测定。

电容器先不加电压,选定一个油滴,待其匀速下落时,它所受重力跟空气浮力与黏滞力之和相平衡,可确定油滴半径。然后在电容器上加一定电压,使同一油滴向上运动,至匀速时,电场力与空气浮力之和跟重力与空气黏滞力之和相平衡,从而可测出油滴所带电荷

$$q=\frac{18\pi}{E}\sqrt{\frac{\eta^3 v_1}{2(\rho-\rho_0)g}}(v_1+v_2)$$

其中 ρ、ρ_0 分别为油滴和空气密度,η 为空气黏滞系数,v_1、v_2 分别为油滴匀速下降、匀速上升时的速度,E 为平板 B_1、B_2 间电场强度,g 为重力加速度。密立根对大量油滴带电量 q 的测量表明,q 总是基本电荷 e 的整数倍,即油滴可能的最小电量为 e,这就是一个电子所带的电量。密立根测得 $e=1.59\times10^{-19}$C,仅比现在的公认值 $e=1.60217733\times10^{-19}$C 小 0.3%,非常准确。

密立根油滴实验揭示了电荷是量子化的这一客观事实,即物体所带电量只能是基本电量 e 的整数倍。为什么电荷是量子化的?物理学至今没有解决。随着研究的深入,确认夸克是比电子、质子等更小的基本物质单元,其所带电量仅为 $e/3$ 或 $2e/3$,称为分数电荷(见“原子核物理学”相关词条),e 不再是最小的电量。

价电子 valence electron 指原子中最外层的电子。这些电子比较活跃,直接参与化学反应,形成化学键。

等效电子 equivalent electron 指一个原子中处于同样轨道上的两个或多个电子,其特征是它们具有同样的主量子数 n 和轨道角量子数 l。例如 2s 轨道上的两个电子为等效电子,3p 轨道上的六个电子亦为等效电子。但 2s 与 2p、2s 与 3s、2s 与 3p 轨道上的电子不是角量子数不同,就是主量子数不同或两者都不同,它们不是等效电子。

同科电子 equivalent electron 又称“等效电子”。

自由电子 free electron 金属晶体中常有些价电子脱离原子在晶体中自由运动,这些电子称为自由电子。加上电场和温度场(存在温度梯度)后,自由电子则形成导电、导热现象。自由电子遵从费米-狄拉克统计。

外逸电子 exoelectron 指从固体表层(厚度约 1×10^{-8} m 以内)发射的能量数量级在 $10^{-1}\sim10$eV 之间的低能电子。产生外逸电子的原因是受外界作用,如金属被光照、加热、切削、研磨,或自身的物理化学变化,如金属发生凝固、氧化、催化等。随着外界作用的增强,外逸电子的发射也相应增强。

原子磁矩 magnetic moment of atom 电子带负电荷 $-e$,因此电子绕原子核的轨道运动相当于一种电流,必然在周围空间产生磁场,电子轨道运动具有的磁性与外形跟电子轨道相同的载流线圈的磁性相当,从而原子中电子轨道运动也产生磁矩,称为原子磁矩,记为 μ,

$$\mu=-\frac{e}{2m_e}\boldsymbol{p}_\varphi$$

其中 $\boldsymbol{p}_\varphi$ 为轨道角动量,e、m_e 为电子的电量、质量。由于电子带负电,μ 与 $\boldsymbol{p}_\varphi$ 方向相反、大小成正比。

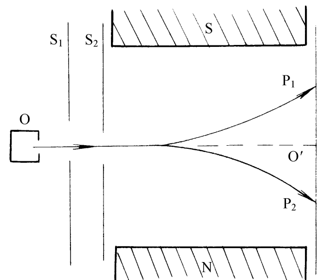
处于定态(n, n_φ)的原子,其角动量 $\boldsymbol{p}_\varphi$ 的数值是确定的,且是空间量子化的,在垂直于轨道平面的 OZ 轴方向的分量 $p_{\varphi z}=m\hbar$,$(m=n_\varphi, n_\varphi-1,\cdots1,0,-1,\cdots-n_\varphi)$其中 n, n_φ, m 分别为主量子数、角量子数和磁量子数,从而原子磁矩 μ 在 OZ 轴方向的分量 $\mu_z=\frac{e}{2m_e}p_{\varphi z}=\frac{e}{2m_e}m\hbar=m\mu_B$。其中

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2m_e}=9.2740154\times10^{-24}\text{J/T}$$

是轨道磁矩的最小量子单元,称为玻尔磁子,作为量度各种粒子磁矩的一种量子单位,在原子物理学和粒子物理学中有广泛的应用。

玻尔磁子 Bohr magneton 见“原子磁矩”。

施特恩-格拉赫实验 Stern-Gerlach experiment 这是施特恩(O. Stern)与格拉赫(W. Gerlach)在 1921 年进行的实验。实验装置如图所示。电炉 O 中银样品的中性蒸汽通过狭缝 S_1 和 S_2 形成银原子束,进入与原子束相垂直的不均匀磁场时发生偏转,在收集板上凝聚成两条对称的条纹 P_1、P_2,改变磁场的不均匀性只能改变条纹间的距离,但仍然只有两条对称条纹。实验表明银原子的磁矩 μ 对外磁场的两种取向是银原子所固有的,与外磁场的有无和不均匀性的大小无关。这是人们首次从实验上直接观察到银原子空间量子化的现象。后来又对其他原子作了同样的实验,均观察到数目不等的对称条纹,但同种原子的条纹的数目是固定的,不随磁场及其不均匀性的变化而



改变，从而证实任何原子都具有空间量子化的属性。见“空间量子化”。

奇特原子 exotic atom 比原子层次还低的粒子，如原子核、电子(e^-)、质子 p、中子 n、正电子(e^+)、μ 子(μ^+,μ^-)、π 介子(π^+,π^0,π^-)，κ 介子、Σ 超子等称为亚原子粒子，这些粒子具有一定的基本特性，如质量 m、电荷 q、寿命 τ 等。有的粒子带正电，如 p、e^+、μ^+、π^+ 以及原子核等；有的粒子带负电，如 e^-、μ^-、π^-、κ^- 等；还有的粒子不带电，如中子、π^0 等。这些粒子中，只有质子、电子、光子是稳定的，其余的都不稳定，会自发地衰变成别的粒子。

上述粒子中任何一个带正电的粒子和一个带负电的粒子，在库仑力作用下形成的类似于原子、但其组成成分跟通常的原子(原子核和电子)不同的束缚态称为奇特原子或奇异原子。奇特原子是类氢系统。奇特原子有两类。一类是由通常的原子核俘获一个带负电的粒子(不是电子)形成的。如 μ^- 子被原子核俘获形成的奇特原子叫 μ^- 原子，由我国物理学家张文裕在 1948 年首先发现，它是不稳定的，经过 2μs 的时间就会衰变。另一类奇特原子是由一般的带正电的粒子(不是通常的原子核)与带负电的粒子形成的库仑力束缚态。如正、负电子形成的正子素或电子偶素(e^+,e^-)，μ^+ 介子与电子形成的 μ 子素(μ^+,e^-)，以及 π—μ 素(π^+,μ^- 或 π^-,μ^+)等。

除了库仑力可以形成束缚态外，在粒子物理中还发现两个粒子在强相互作用下也能形成束缚态，这是更一般的类氢系统。

里德伯原子 Rydberg atom 任何原子，当它的一个最外层电子被激发到主量子数 n 很大(10^1～10^2 数量级)的能级，这样的状态叫做原子的里德伯态，这种高激发态原子称为里德伯原子。1965 年首先用射电天文方法在星际空间中观测到孤立的里德伯原子。在实验室中已研究了 n 在 10～200 之间的里德伯原子。对于氢原子已观测到 n 高到 630 的里德伯态。由于原子中电子轨道半径 $d = a_0 n^2$，原子结合能 $E_0 = -R/n^2$；跃迁能 $\Delta E = 2R/n^3$，原子寿命 $\tau \propto n^3$。里德伯原子的 n 大，因此里德伯原子具有独特的性质，不同于基态或低激发态原子。例如原子非常巨大，有的里德伯原子直径甚至可达到 10^{-5}m，相当于在基态时原子直径的 10^5 倍；寿命非常长，可达 1s，为普通原子较低激发态寿命的 10^8 倍；结合能低，$n=30$ 时约 10^{-2}eV，在 10^2 V·cm^{-1}量级的小电场下能被电离；能级间距小，$n=30$ 时，约为 10^{-3}eV。

在实验室中可利用激光和同步辐射技术来研究里德伯原子的性质。激光方法如下：将两束或多束相交激光束照射到原子束上，产生里德伯原子，然后让其通过电容器平板电场变成离子，用探测器测定其能量，称为多光子共振电离方法。随着激光技术和同步辐射技术的发展，对里德伯原子性质的研究将越来越深入。

着衣原子 dressed atom 在强的交变电磁场中，由于电磁场的作用，原子的能级结构发生变化，例如原子(或分子)在强共振光下出现荧光谱线，在射频共振实验中出现共振频线。常常把这种情况下的原子和电磁场看成一个整体，把这种被光子包围着的原子称为着衣原子，着衣原子的观点可以说明上述光谱线的主要特征。

亚稳原子 metastable atom 指处于“亚稳态”的原子。亚稳态是一种相对稳定的、能够存在较长时间的受激态，也即所谓长寿命的激发态。激发态原子平均寿命的数量级约在 10^{-7}～10^{-8}s，而长寿命激发态原子的平均寿命的数量级约为 10^{-4}～10^{-2}s 或更长。例如，处于 2^1s_0 和 2^3s_1 态的氦原子就是亚稳原子。亚稳原子通过自发辐射发射光子返回基态的概率很小，但可通过第二类非弹性碰撞，将多余的能量传递给别的粒子或器壁，返回基态，这时不发射光子。例如，激光和气体放电等物理过程就是亚稳原子在起重大作用。也可通过吸收光子，跃迁到能级更高的状态，这种高能态跃迁概率较大，然后通过自发跃迁返回基态。

D 原子 D-atom 就是氘原子，见“氘”。

磁氢原子 monopole hydrogen atom 一种假想的原子。它是由带正电荷 $+Ze$ 的磁单极子作为“原子核”与核外电子构成的原子。

反氢原子 antihydrogen atom 指氢原子的

反物质,即由正电子 e^+ 和反质子 p^- 构成的反原子,称为反氢原子,$\bar{H}=e^+p^-$。由于合成截面太小,产生反氢原子的困难很大,直到1995年底,才由W.Oelert领导的一个欧洲研究组在LEAR(low energy antiproton ring)上产生并探测到世界上第一个反氢原子。反氢原子是这样产生的:用一个2MeV反质子束通过Xe原子核的库仑场,产生正负电子对,反质子会俘获其中与其速度相同的正电子,形成快速运动的反氢原子,继续向前运动。这样得到的反氢原子寿命很短,在湮没前仅存在37ns。研究反氢原子的性质很重要,可以揭示反物质的一般规律。

氘 deuterium 氢为 ^1_1H,氘为 ^2_1H 或D,即氢的质量数为2的同位素,又叫重氢。1932年为尤雷(H.C.Urey)发现。氘化学活性较氢稍弱,与氧化合生成的水称重水(D_2O)。高速运动的氘核 ^2H 能参与许多核聚变反应,反应过程中释放出巨大的能量。两个氘核的聚变反应中单位质量的氘核放出的能量3.6MeV,是单位质量的铀核 ^{235}U 裂变放出的能量0.85MeV的近4倍。

重水 heavy water,deuteroxide 由氘(^2_1H 或D)与氧化合生成的水,叫重水,记为 D_2O。它的物理性质跟普通水有些差别。密度、比热容比普通水稍大,20℃时密度为1.10726(普通水为0.99998),4～25℃之间的比热容为1.028(普通水为1.018)。熔点3.8℃,沸点比普通水高1.4℃。介电常数、表面张力比普通水稍低。每克氘经聚变可释放出 10^5kWh的能量,自然界中的水有0.015%为重水,地球表面的海水中含氘约 10^{17}kg,蕴藏的聚变能是 10^{25}kWh,按目前世界能源消耗水平,可使用几百亿年,真可谓取之不竭的能源。重水还可作为核反应堆中的中子减速剂。

正氢 orthohydrogen 两个质子的自旋平行的氢分子叫正氢。两个质子的自旋反平行的氢分子叫仲氢。正氢为三重态,仲氢为单一态。一般情况下,正氢与仲氢的两种状态不能互相转换,但可混合共存。

仲氢 parahydrogen 见"正氢"。

正氦 orthohelium 氦原子(^4_2He)中两个电子的自旋平行的能量状态称为正氦,而氦原子中的两个电子的自旋反平行的能量状态称为仲氦。正氦自旋量子数 $S=1$,为三重态;仲氦自旋量子数 $S=0$,为单一态。正氦与仲氦两种能态之间按照选择定则不能产生跃迁,但当用电子或其他原子与正氦原子或仲氦原子碰撞时,有可能实现它们之间的跃迁。

仲氦 parahelium 见"正氦"。

放射性元素 radioactive element 有些元素的原子核不稳定,不断发出射线,自身转变成另一种原子核,这种元素称为放射性元素,这种现象称为放射性衰变。

放射性元素发出的射线能使气体电离或照相底片感光或荧光物质发光,大多为三种射线:α射线,由带 $+2e$ 电荷的氦原子核(即α粒子)组成,具有很强的电离作用;β射线,由带 $-e$ 电荷的快速电子组成,穿透本领较强;γ射线,波长很短的(一般 $<10^{-11}$m)的电磁辐射,不带电荷,穿透本领强。

1896年法国物理学家贝可勒尔(A.H.Becquerel)首先发现了铀的放射现象,这是人类认识原子核的开始,它促进了原子物理学的发展和对原子核的研究。

存在于自然界的放射性元素称为天然放射性元素,如铀、镭、钍等。通过人工方法制成的放射性元素称为人工放射性元素,如钴60等。

天然放射性元素 natural radioactive element 见"放射性元素"。

人工放射性元素 artificial radioactive element 见"放射性元素"。

放射性同位素 radioactive isotope 一种元素常含有质量不同的原子,它们的原子核中含有的质子数相同,中子数不同,即它们的原子序数相同,在元素周期表中处于同一位置上,称为同位素(见"原子核物理学"中"同位素"词条)。

在已发现的各种元素的同位素中,小部分的原子核是稳定的存在于自然界中,大部分的原子核是不稳定的,会自发地发出各种射线,转变(又称衰变)成其他质量较轻的元素,这种具有放射性的不稳定的同位素称为放射性同位

素,可见于人工制造和天然存在的同位素中。例如天然的放射性同位素$^{238}_{92}U$,$^{232}_{90}Th$,$^{235}_{89}Ac$等,人工获得的放射性同位素$^{60}_{27}Co$,$^{137}_{55}Cs$,$^{239}_{94}Pu$等。

卢[瑟福](单位) Rutherford 量度放射性物质的放射性强度的国际单位制(SI)单位是秒的倒数(s^{-1}),它表示每秒发生一个衰变事件的物质的放射性强度。卢[瑟福]是放射性强度的一种单位,它指放射性物质每秒发生10^6个衰变事件时的放射性强度,记为rd。因此,$1rd=10^6s^{-1}$。其分数单位为毫卢($1mrd=10^{-3}rd=10^3s^{-1}$)和微卢($1\mu rd=10^{-6}rd=1s^{-1}$)。

非国际单位制中放射性强度的标准单位是居里(Ci),1居里为1克镭的放射性强度,1克镭每秒发生3.7×10^{10}个衰变事件,因此

$1Ci=3.7\times10^{10}s^{-1}=3.7\times10^4rd$

$1rd=2.7\times10^{-5}Ci$。

电子伏[特](单位) electron-volt(eV) 为量度微观粒子能量的一种非国际单位制的能量单位。它表示一个电量与电子电量大小相同的粒子通过电势差为1伏特的电场加速后,增加的能量,叫做一个电子伏[特],记为eV。电子伏与其他能量单位的关系为:

$$1eV=1.60217733\times10^{-19}J$$

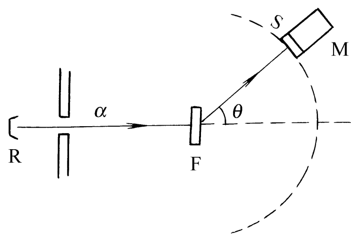
$$1MeV=10^6eV=1.60217733\times10^{-13}J$$

二、原子结构

Atomic Structure

汤姆孙原子模型 Thomson atomic model 这是汤姆孙(J.J.Thomson)1898年提出的关于原子结构的一种假设,1903年、1907年作了进一步的完善,认为原子为半径约$10^{-10}m$的球体,带正电的物质均匀地分布于球体内,带负电的电子一颗一颗地镶嵌在球内各处的一个个同心环上,第一个环上可放5个电子,第二个环上可放10个,……原子中正负电荷总量相等。原子处于最低能态时,电子在平衡位置不动。当原子被激发到高能态时,电子在平衡位置上作简谐振动,并发射电磁辐射。汤姆孙模型在解释元素的周期性方面取得了一定的成功,也能定性地解释原子的光辐射,例如,对于氢原子,根据汤姆孙原子模型,可有一个远紫外频率的光辐射,但不能解释实验观测到的大量不同频率的氢原子光谱。虽然汤姆孙模型被1911年原子对α粒子散射的系列实验否定了,但是,"同心环"和"环上只能安置有限个电子"的思想还是可贵的。

α粒子散射实验 α-particles scattered experiment 这是卢瑟福(E.Rutherford)等人在1911年做的原子对α粒子散射的一系列试验。实验装置如图所示,α粒子从放射源R发出经过准直成束后入射到金属箔F上,散射后的α粒子到达荧光屏S会产生闪光,在一定时间内经显微镜M记录下来的闪光次数就是同期到达S的α粒子数。散射角θ是α粒子散射方向跟入射方向的夹角,转动荧光屏S和显微镜M不改变散射角θ,θ角可随时测量。整个实验装置保持一定的真空度,以避免α粒子跟空气分子碰撞产生干扰。实验结果显示,绝大多数α粒子的散射角$\theta<1°$,基本上没有偏转,但是大角度散射($\theta\geqslant90°$)的α粒子竟占1/8000之多,不可思议的是甚至有$\theta\approx180°$的所谓背散射的粒子。这个实验事实汤姆孙模型无法解释,促使卢瑟福原子模型的诞生。



卢瑟福原子模型 Rutherford atomic model 这是卢瑟福根据α粒子散射实验结果提出的原子模型。α粒子散射实验中出现的大角度($\theta\geqslant90°$)散射粒子数约占入射总数的1/8000的现象无法用汤姆孙原子模型解释,卢瑟福提出一种完全不同的原子结构设想,他认为,任何原子中的全部正电荷和绝大部分质量(99.9%以上)都集中在原子的中央区域,形成一个很

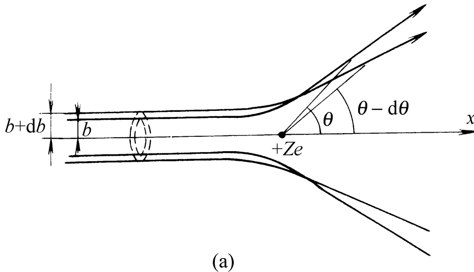
小的原子核（半径约为 10^{-14}m），电子分布在核外半径约为 10^{-10}m 的范围内，在核的周围运动。原子的大小实际上就是电子的运动范围的尺度。这就是卢瑟福原子模型，也称原子的核式模型。根据这个模型建立的 α 粒子散射理论跟实验结果符合很好。

有效散射截面 effective scattering cross-section 1911 年卢瑟福根据 α 粒子散射试验结果提出了核式原子结构模型，随即在此基础上建立 α 粒子散射理论，导出散射公式。在一个粒子被一个金属原子（核）散射的情况，导出的散射角 θ 的公式为

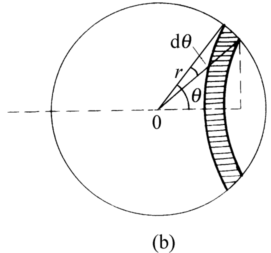
$$\cot\frac{\theta}{2}=4\pi\varepsilon_0\frac{mv^2}{z_1z_2e^2}b$$

其中 z_1、z_2 分别为 α 粒子和金属箔原子的核电荷数，m、v 为 α 粒子的质量和初速，e 为电子电荷，b 为瞄准距离。金属原子看做不动，将取为实验室坐标系原点 O，入射 α 粒子初速 v 的方向取为 x 轴正向时，该粒子到 x 轴的距离就叫做该粒子的瞄准距离 b，如下图所示。在入射 α 粒子初速一定的情况下，散射角 θ 只与瞄准距离 b 有关，b 大则 θ 小，b 小则 θ 大。

有效散射截面 σ 是原子物理学中表征原子碰撞散射概率的物理量，通常用瞄准距离 b 为半径的圆的面积来表示散射粒子的有效散射截面，即 $\sigma=\pi b^2$。对 α 粒子散射，其有效散射截面 σ 只需将前式中的 b 代入即可得到。



(a)



(b)

微分散射截面 differential cross-section 在卢瑟福 α 粒子散射理论中，在考虑一束 α 粒子被一个金属原子（核）散射的情况下，需引进 α 粒子散射角在 θ 方向附近 $\mathrm{d}\theta$ 小范围（θ～（$\theta-\mathrm{d}\theta$）之间）内的散射概率的概念，即所谓微分散射截面的概念，它表示一个金属原子把 α 粒子散射到 θ 方向 $\mathrm{d}\theta$ 范围内的散射概率。

从上图可以看出，当入射 α 粒子的瞄准距离为 b 时，其散射角为 θ，若瞄准距离增为 $b+\mathrm{d}b$ 时，散射角改变为 $\theta-\mathrm{d}\theta$，当 $\mathrm{d}b$ 为正值时，$\mathrm{d}\theta$ 也取正值，在垂直于 x 轴的平面中取内半径为 b、外半径为 $b+\mathrm{d}b$ 的圆环，通过此圆环入射进来的 α 粒子被金属原子散射后，均位于顶角为 θ 和 $\theta-\mathrm{d}\theta$ 的两个圆锥面形成的空心圆锥体内，圆环的面积为 $\mathrm{d}\sigma=2\pi b|\mathrm{d}b|$，空心圆锥体与半径为 r 的球面的相交区域是半径为 $r\sin\theta$，宽度为 $r\mathrm{d}\theta$ 的球带，其所张的立体角 $\mathrm{d}\Omega=2\pi r\sin\theta r\mathrm{d}\theta/r^2=2\pi\sin\theta\mathrm{d}\theta$。由散射角 θ 的公式（见“有效散射截面”），求出 $\mathrm{d}b$，将其中的 $\mathrm{d}\theta$ 改为 $\mathrm{d}\Omega$，则得

$$\mathrm{d}\sigma=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left(\frac{z_1z_2e^2}{2mv^2}\right)^2\frac{\mathrm{d}\Omega}{\sin^4(\theta/2)}$$

这里 $\mathrm{d}\sigma$ 就称为一个金属原子将 α 粒子散射到 θ 方向附近 $\mathrm{d}\Omega$ 立体角内的微分散射截面。

卢瑟福散射公式 Rutherford scattering formula 在 α 粒子散射模型中，考虑金属箔有一定厚度，一个 α 粒子穿过金属箔会被许多金属原子散射，当有 n_0 个入射 α 粒子时，微分散射截面（“微分散射截面”）应为 $\mathrm{d}n=Ntn_0\mathrm{d}\sigma$，并改写成

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\Omega}=\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2Nn_0t\left(\frac{z_1z_2e^2}{2mv^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

它代表在散射角 θ 方向单位立体角内金属箔散射的 α 粒子数，这就是卢瑟福散射公式。其中 N 是金属箔单位体积原子数，t 为金属箔厚度，$\mathrm{d}n$ 是散射角 θ 到 $\theta-\mathrm{d}\theta$ 之间的立体角 $\mathrm{d}\Omega$

内的被散射的 α 粒子数。

若在每次实验中，仅改变一种实验条件，从上式可得四种函数关系：

(1)同一 α 粒子源，同一金属箔，仅改变散射角 θ，则 $\frac{dn}{d\Omega}\sin^4(\theta/2)=$ 常数，$\frac{dn}{d\Omega}$ 与 $\sin^4(\theta/2)$ 成反比。

(2)同一 α 粒子源，同一种金属箔，同一散射角，改变金属箔厚度 t，有 $\frac{dn}{d\Omega}\propto t$。

(3)同一 α 粒子源，同一金属箔，同一散射角，改变 α 粒子初速，有 $\frac{dn}{d\Omega}v^4=$ 常数，即 $\frac{dn}{d\Omega}$ 与入射 α 粒子的动能 E 的平方成反比。

(4)同一 α 粒子源，同一散射角，对同一 Nt 值，则 $\frac{dn}{d\Omega}\propto Z_2^2$。

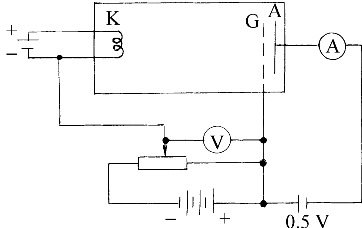
上述四个结论，在 1913 年盖革–马斯顿实验中得到证实，仅第四个结论中金属原子电荷数 Z_2 测量不够准确。1920 年，查德维克(J. Chadwick)改进了实验装置，用卢瑟福散射公式第一次直接从实验测定了 Cu、Ag、Pt 的核电荷数 Z_2，证明了原子的核电荷数等于该元素的原子序数，有力地证明了卢瑟福散射公式的正确性。

盖革–马斯顿实验 Geiger-Marsden experiment 指 1913 年盖革(H. Geiger)与马斯顿(E. Marsden)为了检验卢瑟福散射公式是否正确而做的 α 粒子散射实验。实验中通过每次改变一个实验条件(散射角 θ，或金属箔的厚度 t，或入射 α 粒子的动能 $E=\frac{1}{2}mv^2$，或不同元素做的金属箔，即核电子数 Z_2 不同，但保持 Nt 值不变)，来检验根据卢瑟福散射公式得出的四种关系，这四种关系均得到证实。证明卢瑟福散射公式是正确的。看“卢瑟福散射公式”。

弗兰克–赫兹实验 Franck-Hertz experiment 这是在 1914 年，玻尔理论发表的第二年，弗兰克(J. Franck)和赫兹(G. Hertz)做的一个原子能态的电学测量实验。实验表明：任何原子都存在量子化能级；原子的分立光谱是原子在不同能级间跃迁的结果；能级跃迁也可通过非辐射的方式(例如非弹性碰撞)实现，从而从实验上为玻尔理论关于原子定态、定态间跃迁等假设提供了有力支持。

具体的实验装置如图所示，玻璃容器抽真空后充少量汞蒸气，电子从热阴极 K 出发，经 K 与栅极 G 的电场加速，穿过栅极，到达板极 A，形成板极电流 I，KG 间的电压 U 可调，GA 间为 0.5V 的减速电场，目的在于减少测量中的杂散电流。当电压 U 从 0 增高时，电流 I 逐渐增大，U 升到 4.9V 时，I 突然减小，U 继续增高，I 重新增大，至 2×4.9V 时，I 又突然减小，U 不断升高，I 重复出现增大到突然减小的现象，均在 $U=n\times4.9$V(n为正整数时)出现。同时用分光仪器测得有波长约为 2530Å 的紫外线发射。

对实验的解释如下：设想汞原子的能量是量子化的，第一激发态比基态的能量高 4.9eV。当电压 U 增高时，电子被加速，但电子能量小于 4.9eV，电子与汞蒸气原子的碰撞只能为弹性碰撞，到达板极 A 的电子逐渐增多，因此，电流 I 逐渐增大。U 升到 4.9V 时，电子的动能达到 4.9eV，电子与汞蒸气原子发生非弹性碰撞，电子的动能转化成汞原子的内部能量，使汞原子从基态激发到第一激发态。失去动能的电子，不能克服 GA 间的减速电场而跑到板极 A 去，因而电流 I 突然下降。U 继续增高时，失去动能的电子被重新加速，到达 A 的电子增多，I 重新回升，至 $U=2\times4.9$V 时，这些电子的动能又达到 4.9eV，从而跟汞原子发生第二次非弹性碰撞，使 I 又突然下降，……。当汞原子从第一激发态自发地跃迁回基态时，就放出能量为 4.9eV 的光子，发出波长约为 2530Å 的光谱线。4.9V 就是汞原子的第一激发电势或共振电势，约为 2530Å 的光谱线就是



弗兰克–赫兹实验示意图

汞原子的共振光谱线。

1920 年、1924 年弗兰克和赫兹将实验装置作了改进，重新做了实验，测出了汞原子的许多较高能态的激发电势，如第二激发电势为 6.7V，和更多的发射光谱线，使实验结果更具说服力。

激发电势 excitation potential 将初速很小的自由电子通过电场加速后与处于基态的某种原子进行碰撞，当电场电压升到一定值时，发生非弹性碰撞，加速电子的动能转变成原子内部的运动能量，使原子从基态激发到第一激发态，电场这一定值的电压称为该种原子的第一激发电势。处于第一激发态的原子会自发地跃迁回基态，同时发射光子，光子能量与在第一激发电势下加速的电子动能相等，实验上可以观察到相应的光谱线。如果继续加大电场电压到一系列定值时，会将原子从基态依次激发到第二、第三、……激发态，相应地电场电势这一系列的定值分别称为该种原子的第二、第三、……激发电势。例如，氢原子第一、第二激发电势分别为 10.2V、12V。

原子的第一激发电势又称共振电势，原子从第一激发态返回基态发射的光谱线又称共振光谱线或共振线。

共振电势 resonance potential 即第一激发电势。见“激发电势”。

电离电势 ionization potential 在电场中加速的自由电子与处于基态的中性原子碰撞，当自由电子的动能大到使原子失去一个电子电离成带 $+e$ 电荷的一次离子，这时的电场电压叫做该原子的第一电离电势，简称原子电离电势，常用 U_1 表示。例如氢原子 $U_1=13.6\text{V}$，锂原子 $U_1=5.4\text{V}$，eU_1 就是原子最低游离态能级 E_∞ 与基态能级 E_1 之间的能量间距（$E_\infty-E_1$）。如果中性原子已处于某个激发态，则其电离电势相应变小，如处于 $n=2$ 激发态的氢原子，其电离电势为 4.3V，这时 $eU_1=E_\infty-E_2$。

还可用电场加速的自由电子与处于基态的一次离子碰撞，使其再失去一个电子电离成带 $+2e$ 电荷的二次离子，相应的电场电压叫做该原子的第二电离电势，类似地，还有第三、第四、……电离电势。例如，氦原子的第一、第二电离电势分别为 24.6V，54.4V。

中肯电势 critical potential 激发电势与电离电势统称中肯电势。见“激发电势”和“电离电势”。

电子壳层 electron shell 原子中的电子按能量大小，由小到大、从里向外进行分布。所谓电子壳层，是原子中电子分布的一种形象化的描述。电子的能量状态由主量子数 n 和轨道角量子数 l 来表征。原子中主量子数 n 相同的电子属于同一壳层，$n=1,2,3,4,5,6,7$ 的壳层分别称为 K、L、M、N、O、P、Q 壳层，从内向外排列。主量子数 n 相同的电子可有不同的轨道角量子数 l，因此，在一个电子壳层中可以根据轨道角量子数的 n 个数值 $l=0,1,2,\cdots,n-1$，分成 n 个支壳层，这些支壳层分别用符号 s、p、d、f、g、h 来表示。根据泡利不相容原理，角量子数为 l 的支壳层最多可容纳 $2(2l+1)$ 个电子，即 s、p、d、f、g、h 支壳层分别最多容纳 2，6，10，14，18，22 个电子。主量子数为 n 的壳层最多可容纳 $\sum_{l=0}^{n-1}2(2l+1)=2n^2$ 个电子，即 K、L、M、N、O、P、Q 壳层分别最多可容纳 2、8、18、32、50、72、98 个电子。原子中电子在外层壳层的分布随着原子序数 Z 的增加，周期性地重复出现，这就揭示了元素周期表的性质。

按照量子力学观点，原子中电子运动并无严格确定的路径，不同电子的电子轨道可以互相穿越，因此，电子壳层并不代表电子在空间中的确定位置。见“电子云”。

闭合壳层 closed shell 原子中的电子分布在不同的壳层上，在同一壳层上的电子其主量子数 n 相同，每一壳层又可按轨道角量子数 l 的不同数值：$l=0,1,2,\cdots,n-1$，分成 n 个支壳层。根据泡利不相容原理，每一支壳层上最多容纳的电子数为 $2(2l+1)$，每一壳层上最多容纳的电子数为 $2n^2$。当壳层（或支壳层）上的电子数达到 $2n^2$（或 $2(2l+1)$）时，这个壳层（或支壳层）就称为闭合壳层（或闭合支壳层）。

原子最外壳层为闭合壳层的化学元素是最稳定的，它不容易失去或得到电子，因此，不容

易与其他元素发生化学反应,如氦、氖、氩、氪、氙等就是这一类元素,它们的常态为气态,由于化学性质不活泼,又称惰性气体。

电子组态 electron configuration 原子中每个电子的状态是确定的,可用主量子数 n、轨道角量子数 l、磁量子数 m 来表示,记作(n,l,m),称为电子定态。由于 n、l 相同、m 不同的电子的能量是相同的,即电子能量对 m 是简并的,因此可用(n,l)表示电子能态或电子态。分别用符号 s、p、d、f、g、h 表示轨道角量子数 $l=0,1,2,3,4,5$ 的状态,处于这些状态的电子分别称为 s 电子,p 电子,d 电子,f 电子,g 电子,h 电子。将主量子数 n 写在轨道角量子数符号的前面,如 1s,2s,2p,3d,4f,5g 分别表示处于能态$(n,l)=(1,0),(2,0),(2,1),(3,2),(4,3),(5,4)$的电子。把具有相同轨道角量子数的电子数记在轨道角量子数符号的右上角,如 $s^2,p^6,\cdots\cdots$。

原子有 Z(原子序数)个电子,这 Z 个电子的能态组合$(n_1,l_1)(n_2,l_2)\cdots\cdots(n_z,l_z)$表示原子的一定能态,叫做该原子一定状态的电子组态,它说明原子中电子在 n 和 l 不同的能态中的分布情况。例如钾原子($Z=19$)的电子组态是 $1s^22s^22p^63s^23p^64s^1$,表示由里向外处于 1s,2s,2p,3s,3p,4s 能态或支壳层上的电子数分别为 2,2,6,2,6,1。由里向外壳层 K,L,M,N 上的电子数分别为 2,8,8,1。最外层电子(即价电子)只有一个。而铀原子的电子组态是 $1s^22s^22p^63s^23p^63d^{10}4s^24p^64d^{10}4f^{14}5s^25p^65d^{10}5f^3 6s^26p^66d^17s^2$,最外层电子有 2 个。电子从里向外逐层填充。

随着原子序数 Z 的增大,外层的电子组态周期性地重复,而外层的电子组态(即价电子)是决定元素化学性质的,因此元素周期表中元素化学性质出现周期性地相似,这就解释了元素周期表。

用电子组态描述原子状态是不全面的,只能表明各个电子的运动轨道的形状和大小,而电子轨道平面的取向,自旋的取向是没有表达的。

电子云 electronic cloud 量子力学中用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$来描述原子中电子的运动状态。$|\psi|^2$称为概率密度,代表在空间 $\boldsymbol{r}$ 处附近单位体积中电子出现的概率。将$|\psi|^2$在空间中的分布画出来,得到像云一样的三维图像,让空间任何一点上云的密度跟该点的概率密度成正比,这样的三维图像就称为电子云。需要指出的是:一个电子并不同时占据这个电子云分布的整个空间;也不能用轨道来描述电子的运动;空间某一点电子云密度只是在该点附近单位体积中发现电子的概率。

三、原子理论
Atomic Theory

光量子 light quantum 1901 年,普朗克提出与经典概念相悖的“能量子”假设,从而得以导出符合实验曲线的绝对黑体辐射公式。他把绝对黑体空腔内壁看成是由许多带电的谐振子所组成的,并且频率为 ν 的电磁波是由频率为 ν 谐振子发射和吸收的;他并且假定谐振子是不连续的,只能处于一些特定的分立的能量状态上,它们的能量值是最小能量 ε 的整数倍,它与频率 ν 成正比:

$$\varepsilon=h\nu$$

式中的常数 h 称作普朗克常数。发射和吸收的电磁波因而也是不连续的、而是一份份能量值 ε。爱因斯坦比普朗克更进一步,他在 1905 年提出“光量子”假设,认为光就是由一个个能量为 $h\nu$ 的微粒组成的;它们也具有动量,其值为 $p=\varepsilon/c$。在碰撞时光量子(光子)也遵守能量守恒定律和动量守恒定律。据此爱因斯坦给出了他的光电效应公式,并为康普顿的 X 射线散射实验所证实。

玻尔氢原子理论 Bohr hydrogen atom theory 在量子理论建立之前,1913 年丹麦物理学家玻尔在卢瑟福原子模型的基础上,引用普朗克的量子概念,提出一些量子化假设(见“玻尔假设”),很好地解释了氢原子光谱的规律。玻尔理论得到的氢原子能级由下式给出:

$$E_{\mathrm{n}}=-(me^4/8\varepsilon_0^2h^2n^2)$$

$$n=1,2,3,\cdots$$

结合 Bohr 频率条件，就可得到氢原子光谱。

玻尔氢原子理论表明，经典理论不适用于原子内部的运动，微观粒子的运动服从量子规律。

玻尔假设 Bohr postulates 玻尔在解释氢原子光谱的规律时提出以下几条量子化假设：

1. 电子在原子中绕原子核只能在一些特定的轨道上运动。与经典理论的要求不同，电子在轨道上虽做加速运动，并不辐射电磁能量，其能量状态是固定不变的(称作定态)；

2. 角动量 mvr 是 $h/2\pi$ 的整数倍的轨道才是允许的轨道，即 $mvr = nh/2\pi$，式中的 n 必须是整数，常数 h 称为普朗克常数；

3. 从能量为 E_i 跃迁到能量为 E_f 的定态时，伴随着发射或吸收频率为 ν 的单色光辐射，频率 ν 由以下条件决定(Bohr 频率条件)：$h\nu = E_f - E_i$。

玻尔轨道 Bohr orbit 玻尔在其氢原子理论中试图用电子绕核运动的圆形轨道来解释氢原子光谱规律(见"玻尔氢原子理论"及"玻尔假设")。由 Bohr 频率条件可求得主量子数为 n 时的电子轨道半径 r_n 等于

$$r_n = n^2(\varepsilon_0 h^2/\pi me^2)$$
$$n = 1, 2, 3, \cdots$$

量子力学、特别是测不准原理证实，在原子尺度内轨道的概念是没有意义的。(见"电子轨道")

玻尔半径 Bohr radius 在玻尔氢原子理论中，最小的轨道半径，也就是能量最低的稳定状态。这时主量子数 $n = 1$，轨道半径 $r = \varepsilon_0 h^2/\pi me^2$(见"玻尔轨道")，这个半径是稳定的氢原子的半径轨道，称作玻尔半径，与实验值符合得相当好。

电子轨道 electron orbit 在玻尔及索末菲理论中，电子绕核沿满足一定条件的轨道运动。轨道的概念在原子的尺度内实际上没有意义，在近代原子理论和分子理论中，电子轨道是指描述电子在原子或分子中的分布，亦即由一个波函数来表征的特定的空间概率分布。

电子轨道磁矩 magnetic moment of electron orbit 电子是带电粒子，它绕核运动将形成电流而产生磁矩，称作电子轨道磁矩。其值 μ 与轨道角动量 p 之间的关系由下式给出：

$$\mu = -(e/2m_e)\boldsymbol{p}_\varphi$$

根据玻尔-索末菲理论的量子化条件(见"索末菲理论")，可得到电子轨道磁矩的值 μ：$\mu = n_\varphi(eh/4\pi m_e c) = n_\varphi \mu_B$，式中的常数 μ_B 称作玻尔磁子。

定态 stationary state 在玻尔及索末菲理论中，稳定的电子轨道状态称作定态。

基态 ground state 基态是能量最低的定态。

激发态 excitation state 能量高于基态的定态称作激发态。由于碰撞等原因，电子可能获得一定的能量从基态跃迁到较高能量的激发态。

量子跃迁 quantum transition 电子由一个量子态过渡到另一量子态，称作量子跃迁。

辐射跃迁 radiative transition 当原子或分子中的电子由较高能级跃迁至低能级，伴随有电磁辐射发出时，这种跃迁称为辐射跃迁。

非辐射跃迁 non-radiative transition 在许多过程中，原子或分子中的电子由较高能级跃迁至低能级并不发出电磁辐射，称作非辐射跃迁。例如，处于亚稳能级的原子和离子在高真空条件下通过辐射过程而跃迁到低能级一般是很慢的，在气体放电现象中它会通过碰撞或者向器壁的扩散而快速地释放能量，从而跃迁到低能级。

玻尔对应原理 Bohr correspondence principle 玻尔于 1923 年清晰表述的对应原理，其内容大致为：

1. 任何一个物理系统的量子理论计算结果，在所有细节上都必定对应于经典结论。当系统量子态的量子数非常大时，量子理论的计算结果必定与经典结论相同；

2. 任何一个物理系统的量子理论选择定则，在其经典极限(大量子数)情况下也必须与经典结论一致。

在量子力学建立之后，对应原理可从量子力学导出。在此之前，它有助于确定选择定则；此后它仍然经常是验证量子计算正确性的一个很好的判据。

原子能级 atomic energy level 原子中的电子只能在一系列不连续的状态下运动，它们具有不连续的能量值。这些不连续的能量数值称作原子能级。

原子的结合能 binding energy of atom 原子中的电子，由自由状态成为被核束缚的状态所能释放的能量，称作原子的结合能。

非量子化轨道 non-quantiative orbit 一些轨道之间不是分立而是连续的，则这些轨道是非量子化轨道。自由电子的轨道是非量子化轨道。

索末菲理论 Sommerfeld theory 索末菲将玻尔理论推广到椭圆轨道的情形。索末菲理论用一个主量子数 n 表征所容许的、分立的椭圆轨道的大小；用角量子数 n_φ 表征所容许的、不同的、分立的椭圆形状；用磁量子数 m 表征所容许的椭圆轨道的不同的、分立的取向。此外，索末菲理论还进一步考虑了相对论效应的修正。

索末菲理论能够相当好地说明类氢原子比较复杂的光谱结构。

索末菲理论中量子化条件的引入：电子的每个自由度都必须按以下公式量子化：

$$\oint p_i \mathrm{d} q_i = n_i h$$

式中的 p_i 和 q_i 分别是第 i 个自由度的广义动量和广义坐标，量子数 n_i 必须是整数。椭圆轨道有两个自由度：一个径向坐标 r 和一个角坐标 φ，它们的量子化条件分别为

$$\oint p_r \mathrm{d} r = \oint m\dot{r} \mathrm{d} r = n_r h$$

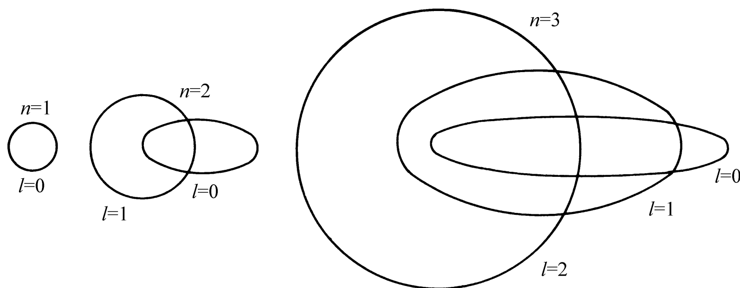
$$\oint p_\varphi \mathrm{d} \varphi = \oint m r^2 \dot{\varphi} \mathrm{d} \varphi = n_\varphi h$$

式中的 p_r 和 p_φ 分别是相应广义坐标 r 和 φ 的广义动量。n_r 称径向量子数，n_φ 称角量子数。$n_r = 0, 1, 2, 3, \cdots$；$n_\varphi = 1, 2, 3, \cdots\cdots$。引入一个量子数 $n = n_r + n_\varphi$，它与椭圆轨道的半长轴 a 及半短轴 b 有以下关系：$n / n_\varphi = a / b$。整数 n 称作主量子数，n_φ 等于零时半短轴 b 为零，这意味着电子将与核碰撞，因而 n_φ 等于零是不允许的，故最小值只能为 1 而最大值为 n。

对于圆轨道，r 是个常量，n_r 恒为零；角坐标的量子化条件变成玻尔假设的量子化条件 $mvr = n_\varphi h / 2\pi$。

当考虑到椭圆轨道在空间的可能取向时，需引入第三个坐标–方位角坐标 ψ，由此需引用相应的量子化条件，并从而导入磁量子数 m（见“空间量子化”）。

索末菲理论中的角量子数 n_φ 与量子力学中的角量子数 l 稍有不同：l 可以为零，较索末菲理论中的角量子数 n_φ 的值小 1（$l = n_\varphi - 1$）。



简并度 degeneracy 在同一能级上的量子态数，称为该能级的简并度。

简并性 degeneracy 如果几个不同量子数的量子态具有相同的能量，则称它们是简并的。

非简并 non-degenerate 如果某个能级只有一个量子态，则该能级称为非简并的。

空间量子化 space quantization 索末菲指出，电子绕核运动的椭圆轨道的方位也是量子化的，轨道平面在空间不能任意取向，只能取

一些特定的方位，这一特性称作空间量子化（见“索末菲理论”），相应的量子数称作磁量子数 m。

磁量子数 m 的引入：按量子化条件，方位角坐标 ψ 的量子数 n_ψ 需满足以下条件：

$$\oint p_\psi \mathrm{d}\psi = n_\psi h$$

式中的 p_ψ 是相应坐标 ψ 的广义动量。考虑到 p_ψ 是角动量 p_φ 在 z 轴方向上的投影（$p_\psi = p_\varphi \cos\alpha$），可用一个可正可负、绝对值等于 n_ψ 的整数 m 来代替量子数 n_ψ，它能取的整数值为：

$$m = n_\varphi, n_\varphi - 1, \cdots, 2, 1, 0, -1, -2, \cdots, -(n_\varphi - 1), -n_\varphi$$

这就是磁量子数 m，它表征椭圆轨道相对于这一特定方向、或外磁场方向可容许的取向。

电子自旋 electron spin 最初，电子自旋是乌伦贝克（G. E. Uhlenbeck）和古兹米特（S. A. Goudsmit）两人在 1925 年为了解释碱金属谱线的双线性和三线性分裂原因，而提出的一个假设：电子具有自旋，亦即电子就像一个具有一定角速度的带电小球，具有一定的机械动量矩。

电子自旋可以从狄拉克相对论方程自然导出。不过，它并不是相对论现象，也可能不涉及相对论而得出自旋存在的结论。

自旋磁矩 magnetic moment of spin 带电粒子自旋产生的磁矩称作自旋磁矩。

朗德 g 因子 Landé ***g*-factor** 一个电子或原子的朗德 g 因子决定于其自旋角动量 S，轨道角动量 L 以及总角动量 J，它由下式给出：

$$g = 1 + 1/2\{[J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)]/J(J+1)\}$$

朗德 g 因子与电子的“反常” g 因子有着密切关系。在轨道角动量 L 为零的极限情形下它们是相等的（此时 J 只能等于 S，朗德 g 因子等于 2）。

当自旋角动量 S 为零时，J 等于 L，角动量是纯轨道的，朗德 g 因子如所预期等于 1。

原子的矢量模型 vector model of atom 原子的矢量模型是应用矢量来表示原子中电子角动量耦合的一种方法。

自旋–轨道相互作用 spin-orbit interaction 原子中的电子既有自旋产生的磁矩，又有轨道运动产生的磁矩，它们之间存在相互作用，这种相互作用称作自旋–轨道相互作用，也称作自旋–轨道耦合。

L-S 耦合 L-S coupling L-S 耦合是角动量耦合的一种极端情形下的近似：它假定自旋–轨道耦合很小，以致只在所有的轨道角动量都相加在一起合成为一个合矢量 **L**，并且所有的自旋角动量都相加在一起合成为一个合矢量 **S**，然后自旋角动量和轨道角动量才能有效地耦合，这时再将轨道角动量合矢量 **L** 和自旋角动量合矢量 **S** 相加成一个总合矢量。**L-S** 耦合也称作 Russell-Saunders 耦合。

j-j 耦合 j-j coupling j-j 耦合是角动量耦合的另一种极端情形的近似：它假定自旋–轨道耦合比轨道耦合要强。这时需要先将每个电子的自旋角动量和轨道角动量相加在一起合成为每个电子的合矢量，然后再将各个电子的合矢量相加为一个总合矢量。

泡利不相容原理 Pauli exclusion principle 在一个原子中，不可能有两个或两个以上的电子具有完全相同的运动状态，或者说，不可能有一个以上的电子占据一个特定的量子态，这个原理称作泡利不相容原理。

原子能级的精细结构 fine structure of atomic energy level 精细结构是自旋–轨道耦合的一种表现形式，自旋磁矩和轨道磁矩之间的相互作用会导致能级的进一步分裂。

洪德定则 Hund rule 洪德定则是根据经验事实而建立的一组规则，它能帮助我们认清原子态的能量顺序：

1. 对于给定的组态，具有最高多重性的谱项能量最低；

2. 对于给定的组态和多重性，具有最大轨道角动量的谱项能量最低；

3. 对于给定的组态、多重性和轨道角动量，若组态是少于半充满壳层的组态，则总角动量 J 值最小的态能量最低；若组态是多于半充满壳层的组态，则总角动量 J 值最大的态能量最低。

朗德间隔定则 Landé interval rule 朗德间

隔定则是关于多重态中相邻能级的能量间距的一个规则，它预言相邻能级的能量间距正比于最高能量能级的总角动量量子数。

四、原子光谱
Atomic Spectrum

原子光谱 atomic spectrum 光谱是光的波长成分和强度成分的记录；有时只是波长成分的记录。它是研究原子结构的重要途径之一。

原子光谱是原子内部电子运动状态发生变化而产生的，光谱可用光谱仪记录下来。光谱按形状可分为：(1)线状光谱，这类光谱经研究知道是原子所发出的，这种光谱的谱线是分明、清楚的，这表示波长有一定的间隔；(2)带状光谱，有些光源中光谱线是分段密集的，这表示每段中不同波长数值很多，相近的差别很小，密集的谱线看起来并在一起，整个光谱好像是许多片的带所组成，这类光谱是分子所发出的；(3)连续光谱。有些光源发的光具有各种波长，相邻的波长相差极小，或者可说是连续变化的，这就是连续光谱。固体加热如白炽灯所发的光谱是这种形状的，但原子和分子在某些情况下也会产生连续光谱。

连续光谱 continuous spectrum 见"原子光谱"。

发射光谱 emission spectrum 光源所发出的光谱称发射光谱。令发生连续光谱光源的光通过一种吸收物质，然后再通过光谱仪就得到吸收光谱。吸收光谱是在连续发射光谱的背景中呈现出的暗线。

吸收光谱 absorption spectrum 见"发射光谱"。

氢原子光谱 atomic spectrum of hydrogen 氢原子是最简单的原子，从氢气放电管可以获得氢原子光谱，这种光谱在可见区和近紫外区有好多条谱线，构成一个很有规律的系统，谱线的间隔和强度都向短波方向递减。

截至 1885 年，从光谱仪中观察到的氢光谱线已有 14 条，这年巴耳末(J.J.Balmer)对这些谱线分析研究后提出了一个经验公式，以此可算出可见光区域的谱线的波数 $\tilde{\nu}$(即波长的倒数)。

$$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}=\frac{4}{B}\left(\frac{1}{2^2}-\frac{1}{n^2}\right),$$

$$n=3,4,5,\cdots$$

$B=3645.6\text{Å}$，是经验常数。根据此公式算出的波长数在实验误差范围内与测到的数值完全一致，后人称此公式为巴耳末公式，而将其所表达的一组谱线(均落在可见光区域)称巴耳末系。

巴耳末公式 Balmer formula 见"氢原子光谱"。

巴耳末系 Balmer series 见"氢原子光谱"。

里德伯方程 Rydberg equation 1880 年，里德伯(J.R.Rydberg)提出了一个普遍的方程，氢的所有谱线都可以用这个方程表示。此方程为：$\tilde{\nu}=\frac{1}{\lambda}=R_H\left[\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right]=T(n)-T(n')$

$\tilde{\nu}$ 为波数即波长 λ 的倒数，R_H 为里德伯常量，从氢光谱的精密测量得到：

$$R_H=1.0967758\times10^7\text{m}^{-1}$$

从玻尔(N.Bohr)的氢原子理论可算出 R_H 的理论值为 $R=1.0973731\times10^7\text{m}^{-1}$，理论与实验值符合得很好。上式公式中 $n=1,2,3\cdots$ 对每个 n 有一个 $n'=n+1,n+2,n+3\cdots$ 构成一组谱线。

上式中 $T(n)$，$T(n')$称光谱项。

在里德伯方程中

$n=1$，$n'=2,3,4,5\cdots$ 此谱线系在紫外区，为 1914 年莱曼(T.Lyman)发现，称莱曼系。

$n=2$，$n'=3,4,5,6\cdots$ 在可见光区，为巴耳末(J.J.Balmer)发现即巴耳末系。

$n=3$，$n'=4,5,6,7\cdots$ 在红外区，1908 年由帕邢(F.Paschen)发现，称帕邢系。

$n=4$，$n'=5,6,7,8\cdots$ 在红外区，1922 年由布拉开(F.Brackett)发现，称布拉开系。

$n=5$，$n'=6,7,8,9\cdots$ 在红外区，1924 年由普丰德(Pfund)发现，称普丰德系。

里德伯常量 Rydberg constant 见"里德伯方程"。

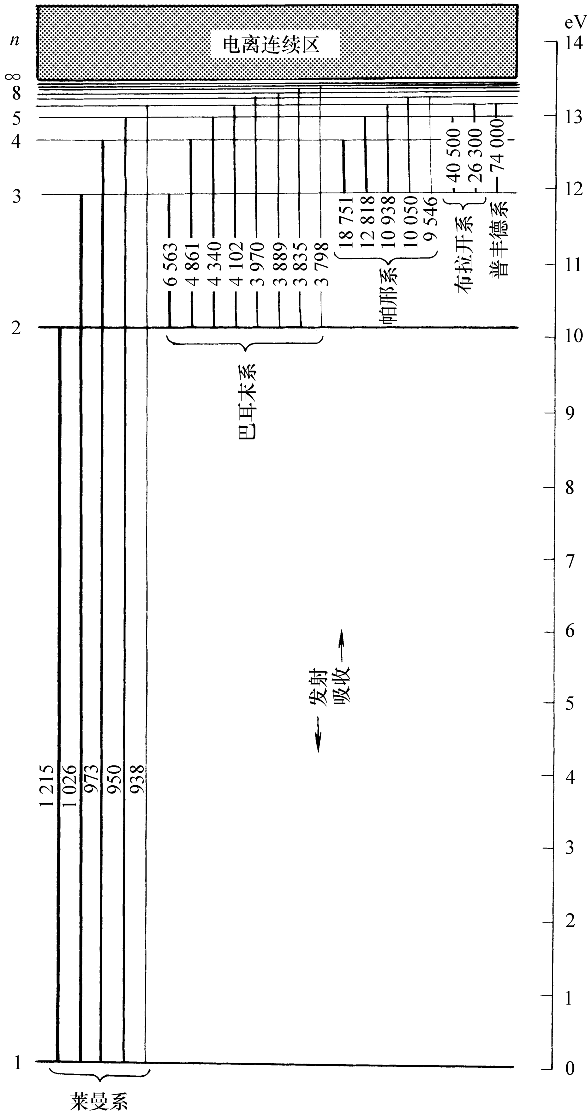
光谱项 spectral term 见"里德伯方程"。

莱曼系　Lyman series　见“里德伯方程”。

帕邢系　Paschen series　见“里德伯方程”。

布拉开系　Brackett series　见“里德伯方程”。

普丰德系　Pfund series　见“里德伯方程”。



氢原子的光谱区各种线系(波长/ Å)

里兹组合原则 Ritz combination principle 里兹在1908年提出,光谱线的波数可表示为二个光谱项之差,即 $\tilde{\nu}=T(n)-T(n')$,这关系式就称为里兹组合原则。但在原子中不能观察到根据组合原则推测的所有谱线,这是因为其中有一部分是不符合选择定则的。组合原则表示的是原子从一种态跃迁到另一种态时所释放出的能量。

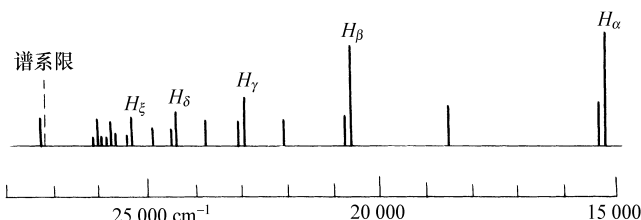
见“光谱项”。

类氢离子 hydrogen-like ion 类氢离子是原子核外层只有一个电子的原子体系,但原子核带有大于一个单元的正电荷。这是具有类似氢原子结构的离子,故称类氢离子。一次电离的氦离子 He^{1+},二次电离的锂离子 Li^{2+},三次电离的铍离子 Be^{3+}都是类氢离子。

由类氢离子发光产生的光谱称类氢离子光谱。类氢离子的能级和光谱与氢原子的能级和光谱相似。

类氢离子光谱 spectrum of hydrogen-like ion 见“类氢离子”。

毕克林系 Pickering series 1897年天文学家毕克林(Pickering)在船艉座ζ星的光谱中发现了一个很像巴耳末线系的线系,其关系如下图所示:



毕克林系与巴耳末系比较图

长线代表巴耳末系,较短的线代表毕克林系谱线

图中可见,毕克林系中每隔一条谱线几乎与巴耳末系重合,但波长稍有差异,有一些谱线位于巴耳末系二邻近谱线之间。经实验证实这是氦离子 He^{1+}的谱线。

离子光谱 ionic spectrum 由离子发光产生的光谱称离子光谱,如氦离子 He^{1+}发生的光谱。见“毕克林系”。

共振辐射 resonance radiation 以钠为例,当钠光入射到钠气中时,钠气中的钠原子受到入射电磁波的感应,从入射波中吸收能量再次发射光而成为共振辐射。共振辐射所发出的光与入射波的光频率相同,其谱线即为共振光谱线。共振辐射是产生激光的原因之一。

共振光谱线 resonance line 见“共振辐射”。

折合质量 reduced mass 前面氢原子谱线可以用里德伯方程表示,(见“里德伯方程”),但方程中的 $R=2\pi^2e^4/(4\pi\varepsilon_0)^2ch^3=109737.315\text{cm}^{-1}$ 与实验值 $R_H=109677.58\text{cm}^{-1}$的误差超过万分之五,而当时的实验精度已达万分之一。对此玻尔作了解释,原来理论中假定氢原子核是静止的,但因氢原子核不是无穷大,所以电子绕原子核运动时,核不是固定不动的,因此,公式中的电子质量应以折合质量 μ 代替,$\mu=\dfrac{Mm}{M+m}$,M 是原子核质量,m 为电子质量,μ 又称约化质量,也可以写为 $\mu=m\cdot\dfrac{1}{1+\dfrac{m}{M}}$。这样里德伯常量的正确表达式应为 $R_A=R/1+\dfrac{m}{M}$。当 M 取∞时,左式简化为 $R_\infty=R$。可见原先得到的里德伯常量计算值 R 实际上是相当于原子核为无穷大的 R_∞,而一般情况下,计算里德伯常量,应该用表达式 R_A,将电子质量 m 和氢核质量 M 代入得到的理论值 R_A 与实验值完全一致。

碱金属原子光谱 atomic spectrum of alkaline metal 碱金属元素是锂 Li,钠 Na,钾 K,铷 Rb,铯 Cs 和钫 Fr。其特点是原子中内层电子与原子核有规则地组合成一个完整而稳固的

结构(称原子实),在原子实外面多余一个电子。如锂原子实由原子核和 2 个电子构成,钠原子实由原子核和 10 个电子构成……。原子实外面的那个电子称价电子,原子的化学性质及光谱都决定于这个电子,所以用讨论氢原子和类氢离子的方法推广到略复杂一点的碱金属原子是很自然的过程。

和氢原子光谱相仿,碱金属原子光谱线也明显地构成几个线系,通常较容易观察到的有四个线系,分别为:主线系、第一辅线系(又称漫线系)、第二辅线系(又称锐线系)和伯格曼线系(又称基线系)。

同样,碱金属原子光谱线的波数(波长的倒数)也可以和氢原子光谱公式相仿表示为二项之差:即 $\tilde{\nu}_M=\tilde{\nu}_\infty-\frac{R}{n^{*2}}$,$R$ 是里德伯常量,和氢原子不同,这里 n^* 从实验数据计算出来不是整数。

主线系 principal series　碱金属原子光谱中的主线系可用下面公式表示,它相当于从 p 能级到 s 能级的跃迁,其波数可表示为:

$$\tilde{\nu}=\frac{R}{(n_1-\alpha_s)^2}-\frac{R}{(n_2-\beta_p)^2}$$

R 为里德伯常量,α_s、β_p 是常数。但对不同的碱金属,α_s、β_p 是不相同的。同样 n_1,n_2 对不同的碱金属原子也不同。

主线系公式还可以表示为

$\tilde{\nu}=n_1\text{s}-n_2\text{p}$　说明是从 n_2p 能级向 n_1s 的能级跃迁。

对锂、钠、钾、铷、铯 n_1 分别为 2、3、4、5、6,$n_2=n_1+1$,n_1+2…。

当观察碱金属的吸收光谱时,我们只能观察到主线系相对应的谱线,这是因为只有主线系与原子的基态相联系,而产生吸收光谱的物质一般都处于基态。

主线系是双线结构,双线裂距随 n 增大而减小。

第一辅线系 first subordinate series　第一辅线系又称漫线系,因这个线系的谱线形状较宽而得名,它相当于从 d 能级到 p 能级的跃迁,其波数可用下式表示:

$$\tilde{\nu}=\frac{R}{(n_1-\alpha_p)^2}-\frac{R}{(n_1-\beta_d)^2}$$

R 为里德伯常量,α_p、β_d 是常数。随不同的碱金属而不同。同样,对不同的碱金属元素有不同的 n_1 和 n_2。

上式还可表示为:

$\tilde{\nu}=n_1\text{p}-n_2\text{d}$　说明是从 n_2d 能级向 n_1p 能级跃迁。

对锂、钠、钾、铷、铯和钫,n_1 分别为:2,3,4,5,6,7,n_2 为 n_1+1,n_1+2…。除锂外,对其他五个元素还有 $n_2=n_1$。

漫线系的谱线要分裂成三条谱线,所以是三重结构。

漫线系 diffuse series　见“第一辅线系”。

第二辅线系 second subordinate series　又称锐线系,因其谱线形状比较锐且细而得名,它相当于外层电子从 s 能级到 p 能级间的跃迁,其波数可用下式表示:

$$\tilde{\nu}=\frac{R}{(n_1-\alpha_p)^2}-\frac{R}{(n_2-\beta_s)^2}$$

式中 R 为里德伯常量,α_p、β_s 是常数,随不同元素 α_p、β_s 也不相同。对不同的元素 n_1、n_2 也不相同。

上述公式还可以写为

$\tilde{\nu}=n_1\text{p}-n_2\text{s}$,说明是从 n_2s 能级向 n_1p 的能级跃迁。

对锂、钠、钾、铷、铯、钫 n_1 分别为 2、3、4、5、6、7。n_2 为 n_1+1,n_1+2,…。

因为 p 能级是双线结构,所以锐线系都是双线的。在外层只有一个电子的原子和离子的光谱中也能观察到类似的谱线。

锐线系 sharp series　见“第二辅线系”。

伯格曼系 Bergman series　又称基线系,处于红外区域。其波数用下式表示:$\tilde{\nu}=\frac{R}{(n_1-\alpha_d)^2}-\frac{R}{(n_2-\beta_f)^2}$

R 为里德伯常量,α_d,β_f 是给定元素的常数。n_1,n_2 随元素不同取不同的值。

伯格曼系还可表示为

$\tilde{\nu}=n_1\text{d}-n_2\text{f}$　说明是电子从 f 能级到 d 能级的跃迁。

对锂、钠、钾 $n_1=3$,$n_2=4,5,6$…等正整数,对铷 $n_1=4$,$n_2=5,6,7$…等。

伯格曼系和漫线系一样是三重线结构。

基线系 fundamental series 见“伯格曼系”。

原子光谱的精细结构 fine structure of atomic spectrum 对原子的线状光谱用分辨本领足够高的仪器进行观察，会发现有的光谱线不是简单的一条线，而是由若干条很邻近的谱线组成的，这称为光谱线的精细结构。精细结构产生的主要原因是相对论效应和电子自旋运动与电子轨道运动之间磁的相互作用，使得原子能级分裂成许多子能级，从而引起谱线分裂。

精细结构常数 fine structure constant 氢原子光谱也存在精细结构，是由于能级分裂，从而引起谱线分裂。相对论效应和电子自旋磁矩与电子轨道运动产生的磁场之间的相互作用引起原子能级能量 E_n 的减少 $\Delta E \propto -\alpha^2 E_n$，α 称为精细结构常数为无量纲常数。

$$\alpha = e^2/2\varepsilon_0 hc \approx 1/137$$

e 是电子电荷，ε_0 为真空介电常数，h 为普朗克常数，c 是光速。

原子光谱的超精细结构 hyperfine structure of atomic spectrum 因为原子核并不是一个质点，有一定的几何大小，其电荷也有一个分布(电四极矩)。它还有自旋角动量和磁矩。这些性质都对电子运动产生影响，使原子光谱进一步分裂，其分裂程度比精细结构还要小，故称为超精细结构，它的起因是超精细相互作用。超精细相互作用引起的能级分裂比精细结构还要小三个数量级，最早观察到超精细结构的是 1891 年迈克尔逊(A. Michelson)，理论上的解释由泡利在 1924 年给出。

塞曼效应 Zeeman effect 1896 年塞曼(P. Zeeman)发现，当把光源放在磁场内时，光源发出的谱线会分裂成几条谱线，这种光谱线是偏振光。(见“偏振”)。此现象称为塞曼效应。

当磁场垂直于观测方向时，一条谱线分裂成三条间隔相等的平面偏振光。当磁场方向与观测方向平行时，一条谱线分裂成二条圆偏振光的谱线。对此，洛伦兹(H. A. Lorentz)用古典物理的方法做出了解释，这种现象称为正常塞曼效应。

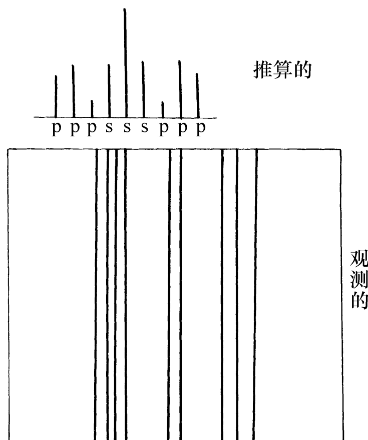
但在以后的许多实验中发现分裂的数目可以不是三条，间隔也不尽相同。其后的 30 年一直未找到合理的解释。所以这种现象称为反常塞曼效应，后来利用电子自旋才说明了反常塞曼效应。

正常塞曼效应 normal Zeeman effect 见“塞曼效应”。

反常塞曼效应 anomalous Zeeman effect 见“塞曼效应”。

帕邢-巴克效应 Paschen-Back effect 在强磁场中，反常塞曼效应回复到正常塞曼效应的现象称为帕邢-巴克效应。对这一现象的解释是因为外加磁场强度不足以破坏自旋-轨道耦合时才会出现反常塞曼效应，但当磁场强时，自旋、轨道角动量分别绕外场旋进，互不相干，这时就回复到正常塞曼效应。

斯塔克效应 Stark effect 1913 年，斯塔克(Johannes Stark)观测到当氢光谱在每厘米十万伏的强电场中激发时，每条光谱都会分裂成一个对称的图样，如图所示。从垂直于电场方向看时，每个图样中都有些部分是平面偏振的，电矢量与电场平行；其余部分是平面偏振光而电矢量与电场垂直，这称为横向斯塔克效应。如沿平行于电场方向来看时则是普通光，这是纵向斯塔克效应。斯塔克效应可用量子论来解释。



氢谱线中 H_α 线的斯塔克效应照片

原子的受激态 excited state of atom 即原子的激发态。每个原子可处于不同状态，在每一

状态具有一定的内部能量。原子内部能量最低的那个状态称为基态。较基态能量高的状态称为原子的激发态。当处于基态的原子获得外加能量时,原子受到激发,能级升高,进入激发态。因此,原子的激发态也称原子的受激态。处于激发态的原子是不稳定的,其寿命是很短的,一般情况下要跃迁到基态或另一个较低的激发态,并发射光子。原子激发态的平均寿命约为 10^{-8}s。

受激态平均寿命 mean lifetime of excited state 见"跃迁概率"。

原子的亚稳态 metastable state of atom 亚稳态是寿命较长的一种受激态。原子、分子、原子核都具有这种受激态。亚稳态的亚稳程度用它的寿命 τ 表示。

亚稳态因为可以在较长时间内保存它的激发能量而在碰撞下放出能量,辐射出光子。所以可以使气体发光,也可以使物质中高能态的粒子数大于低能态的粒子数,实现粒子反转,从而可以产生激光。

自发跃迁 spontaneous transition 原子被激发到高能级后,除了可以通过碰撞释放出能量外,还有可能自发地从高能级跃迁到低能级,把多余的能量以自发辐射形式放出去,这种过程也就是自发跃迁。

受激跃迁 excited transition 当原子处于电磁辐射场中时,原子和辐射场会发生相互作用,考虑原子的两个状态 2 和 1,且 2 的能量 E_2 高于 1 的能量 E_1。若辐射场的辐射频率 ν 满足于 $h\nu = E_2 - E_1$,则有的在状态 E_1 的原子会吸收一个光子 $h\nu$ 的能量跃迁到状态 2,这种称受激吸收。另一些在状态 2 的原子会受场的激发跃迁到状态 1,以辐射形式放出光子 $h\nu = E_2 - E_1$,称受激辐射,故受激跃迁可以有受激吸收和受激辐射这两种过程。

跃迁概率 transition probability 对激发的每个原子,我们不能预知它什么时刻跃迁,我们只能求得跃迁概率。设原子有两个状态 2 和 1,状态 2 时能量大于状态 1。则在 $\mathrm{d}t$ 时间内,从状态 2 跃迁到状态 1 的原子数 $\mathrm{d}N_{21}$ 必然与状态 2 的原子数 N_2 成正比

$$\mathrm{d}N_{21} = A_{21} N_2 \mathrm{d}t$$

A_{21} 是比例常数,$A_{21} = \dfrac{\mathrm{d}N_{21}}{N_2 \mathrm{d}t}$ 表示一个原子在单位时间内由状态 2 自发跃迁到状态 1 的跃迁概率。

因为发生跃迁的原子数 $\mathrm{d}N_{21}$ 也是状态 2 原子的减少数 $\mathrm{d}N_{21} = -\mathrm{d}N_2$ 联合上式积分可以得出 $N_2 = N_{20}\mathrm{e}^{-A_{21}t}$, N_{20} 是 $t=0$ 时的状态 2 的原子数。

我们可以计算出留在状态 2 的原子平均寿命 τ, $\tau = \dfrac{1}{N_{20}}\displaystyle\int_{N_{20}}^{0} t(-\mathrm{d}N_2) = A_{21}\int_0^{\infty} te^{-A_{21}}\mathrm{d}t = \dfrac{1}{A_{21}}$ 可见留在状态 2 的原子平均寿命为跃迁概率的倒数。

振子强度 oscillator strength 应用经典理论处理吸收、色散、散射等问题时发现,假设每个原子或分子中有若干振子(偶极子),它们互相间不起作用,而各自对辐射起作用。发射或吸收的份量与振子的数目成正比,而对于每一种发射或吸收的每个原子中有 f 个振子,称为 f 值或振子强度(1921 年拉登堡提出)。

激发概率 excitation probability 激发概率也就是跃迁概率,见"跃迁概率"。

选择定则 selection rule 观察到的碱金属原子光谱表明,原子发出辐射或吸收辐射的跃迁是有选择性的,它只能在一定的条件下发生。这称选择定则。

对单电子辐射跃迁(如碱金属原子)的选择定则遵循下述规律即

$$\Delta l = \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1。$$

l 表示不同的能级,用字母 s、p、d、f 表示,s 代表 $l=1$,p 代表 $l=2$,d 代表 $l=3$…。

j 是电子总角动量量子数,j 为 $\dfrac{1}{2}, \dfrac{3}{2}$…。

碱金属原子光谱产生的四个线系都是遵守选择定则的,选择定则是经验的总结,在量子力学中有理论的推导。

多电子原子也有选择定则,但要复杂一些。

容许跃迁 allowed transition 遵守选择定则的跃迁,称为容许跃迁,也就是跃迁概率较大的跃迁。

禁戒跃迁 forbidden transition 跃迁概率较小的跃迁。因为通常的光谱线属于偶极辐射,

这是服从选择定则的。但四极辐射和磁偶极的辐射不是绝对成立的。因此在适当条件下虽然违背选择定则，但也可以观察到这种跃迁称禁戒跃迁，禁戒跃迁对应的谱线称禁线。

电子的反常磁矩 anomalous magnetic moment of electron 考虑到电子有自旋，当然还存在与自旋相联系的磁矩，但实验证明磁矩与角动量的关系在原子体系并不普遍成立，所以认为电子有一个 g 因子的存在，这个 g 因子也称朗德(Landé)因子，可表示为

$$g=\frac{\text{测量到的 }\mu_z(\text{以 }\mu_B\text{ 为单位})}{\text{角动量在 }z\text{ 方向的投影}(\text{以}\frac{h}{2\pi}\text{为单位})}$$

μ_B 是玻尔磁子，μ_z 是 μ 在 z 方向上的投影。1947 年库什(P.Kusch)和弗利(H.M.Foley)用当时的新技术微波方法仔细地测量了电子的 g 因子，发现与理论值稍有一点偏差，这就是电子的反常磁矩的发现，其实验结果由施温格(J.Schwinger)做出了解释，认为电子不是孤立的，电子本身带电产生的电磁场对电子本身也有作用，这种作用称为自能。

双光子跃迁 biphoton transition 在高功率的光束下，一个原子可以同时吸收两个光子，达到一定的能量完成一次跃迁，这就是双光子跃迁。双光子跃迁可以发射一个以其倍频出现的新光子，这就是倍频效应，这是一种非线性光学效应。

同位素移位 isotope shift 同一元素的不同同位素具有不同的核质量和电荷分布，对原子的能级有影响，因而引起原子光谱的微小移位，称为同位素移位。其数量级正好落在超精细相互作用范围内。

见“原子光谱的超精细结构”。

同位素效应 isotope effect 同位素是同一元素的化学性质相同，但原子量不同的原子，因此不能用化学方法将其分开，在观察原子光谱时能发现有微小的差异，这种效应称为同位素效应。1932 年，尤雷(H.C.Urey)在实验中发现，在氢的谱线 H_α 线的旁边还有一条谱线，二者只差 1.79Å，他认为这一条谱线属于氢的同位素，即氘，并计算出相应的波长，结果实验与计算符合得很好，从而肯定了氘的存在(D，重氢的存在)。同位素效应又称同位素移位，见“同位素移位”。

兰姆移位 Lamb shift 对氢原子光谱进一步研究，例如对巴耳末系的第一线 H_α 线进行观察，发现其中还有双线结构，但经不少人通过实验测得的间隔都比理论小了 0.010cm^{-1}，这绝不是由于实验的误差引起的。根据当时的理论，巴耳末系第一线中有两个能级，即 $2^2S_{\frac{1}{2}}$ 和 $2^2P_{\frac{1}{2}}$ 是简并的，(简并的意思是说这两个状态的能量是相同的)。后来有人指出，如果 $2^2S_{\frac{1}{2}}$ 比 $2^2P_{\frac{1}{2}}$ 高出 0.03cm^{-1} 就能解释这个问题。

1947 年兰姆(W.E.Lamb)用射频波谱学的方法测得这两个能级并不重合，而有一个裂距，大小为 1057.8 兆赫即 0.033cm^{-1}。这就是著名的兰姆移位。

考虑了这一因素，氢光谱线应当有进一步的分裂，如 H_α 线即包含 7 条谱线。兰姆移位的大小约是精细结构分裂的 1/10，正是兰姆移位等的发现导致了量子电动力学的蓬勃发展。

氦原子光谱 spectrum of helium atom 对多电子原子的光谱，如对两个价电子的氦原子光谱的研究表明，它同碱金属光谱一样存在一系列谱系。但氦有两套谱线系，即有两个主线系，两个第一辅线系，两个第二辅线系等。这两套谱线的结构有显著的差别，其中一套谱线都是单线，另一套谱线却有复杂的结构。通过光谱的研究证实氦原子光谱有两套能级结构。

氢原子能谱 energy spectrum of hydrogen atom 正常情况下的原子(氢原子也是如此)，其能量总是处于最低级，这种状态称基态。比基态高的状态都称为激发态，处于激发态的原子是不稳定的，它将自发地或受外界作用跃迁到较低的状态，发射出一定频率的光。原子能量处于不同的状态可以用能级来表示，每一光谱项对应一定的能级(见“光谱项”)。这样可以画出原子的能级图，这种能级图也就是原子的能谱图。

玻尔(N.Bohr)指出，氢原子的能谱图可用来说明各种线系的产生，可以知道各个能级的能量，也可知道能级之间跃迁产生光的波

长……。

以后，1916年索末菲(A.Sommerfeld)考虑到电子的运动是椭圆轨道及电子运动的相对论效应算出光谱项应加以改正，能级由两个量子数决定，分裂的能级也可算出，与精密的实验符合得很好。

1926年，海森伯(W.Heisenberg)用量子力学严格导出光谱项的表示式，1928年狄拉克(P.A.M.Dirac)用相对论量子力学自然地考虑了电子的自旋，对光谱项作了推导，得到的结果与索末菲一样。1947年，兰姆(W.E.Lamb)观察到在氢光谱中有的能级并不重合，这样氢光谱线发生了进一步的分裂，他认为这是自旋-轨道相互作用而引起的。这就是氢原子光谱研究的历史，研究是在不断地发展和深化的。

复杂原子光谱　spectrum of complex atom　复杂原子是指有三个或三个以上的价电子的原子，其光谱和能级比有两个价电子的更复杂。但任何原子的基态和激发态都可以看做它的一次电离离子加一个电子形成的，而它的一次电离离子又和周期表上前一个元素的状态相似，因此由前一元素的状态可以推断后继元素的状态。

对于三个或三个以上价电子的原子态，在 LS 耦合中能级的重数决定于 s 值，多重数为 $2s+1$。对于三个价电子的系统 s 为 $\frac{1}{2}$ 和 $\frac{3}{2}$，故三电子的体系具有四重态和双重态。每加1个电子，由于 s 值加或减 $\frac{1}{2}$，原有每一类能级的多重结构就转变为二类，一类的重数比原有的增1，另一类减1。(这里 s 是总自旋量子数)。

多重态(多重线)　multiplet　原子量子态的多重性决定于它的总自旋，多重数为 $2s+1$，s 为总自旋量子数。下表说明总自旋量子数 s 对应的多重态。

外层电子为奇数时($s=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2}\cdots$)多重态为偶数($2s+1=2,4,6,8\cdots$)。

外层电子数为偶数时($s=0,1,2,3\cdots$)多重态为奇数($2s+1=1,3,5,7,9\cdots$)。

双电子系统，$s=1$ 表示自旋方向平行，此时为三重态($2s+1=3$)，$s=0$ 时表示自旋方向反平行即为单一态($2s+1=1$)。原子光谱中最大的多重态为11，在钆原子中可看到。

多重态	s	$2s+1$
单一态	0	1
双重态	1/2	2
三重态	1	3
四重态	3/2	4
五重态	2	5
六重态	5/2	6
七重态	3	7
八重态	7/2	8
九重态	4	9
十重态	9/2	10
十一重态	5	11

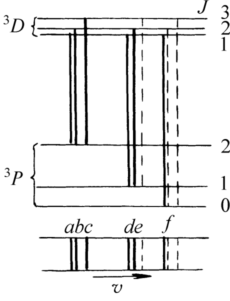
单一态(单线)　singlet　见“多重态”。

双重态(双重线)　doublet　见“多重态”。最著名的如钠原子光谱中的双线，这些双线结构起源于钠的双重态。

三重态(三重线)　triplet　见“多重态”。实际在钙原子光谱中可以见到。

复双重线　composite doublet　碱原子光谱中，漫线系和伯格曼线都是三线结构，但在分辨本领较低的光谱仪中只能见到双线。实际上较强的一根谱线是双线构成的，这是因为它的间隔很小，两条线几乎重合，我们把这组线称为复双重线。

复三重线　composite triplet　复三重线的每



一分支是一个窄的三重线，图上就是它的一组谱线，实线表示看到的谱线（只有六根），虚线表示由于禁戒跃迁而不存在的谱线。但从图中可看出 ab 与 de 这两条谱线的间距是相等，根据这个规则就可以判断含有六根的谱线是否复三重线。

超多重线 supermultiplet 在两个多重群光谱之间所有跃迁产生的谱线。所谓多重群是指某一给定的离子光谱项中那些电子组态相同（但由于电子间的相互作用可以形成不同的原子态），多重数相同的原子光谱项，它们称为一个多重群。

伦琴射线 Röntgen rays 伦琴射线（W.C.Röntgen）又名 X 射线，是伦琴在 1895 年发现的，当时他把这种人们未知的射线命名为 X 射线。这种射线是核外电子产生的短波辐射，波长为 0.01～10Å 或更长一些。X 射线是高速电子打击在物体上产生的，具有使某些物体发出荧光、使气体电离、还能透过一般光透不过的物体的能力，所以在医疗上可用以诊断。它和光一样，也能发生反射、折射、干涉、衍射、偏振等现象。X 射线在科研上可用来研究物质结构、在工业上用于探伤。但 X 射线对人体组织有害，故工作时必须小心防范。

X 射线 X-rays 即伦琴射线。见“伦琴射线”。

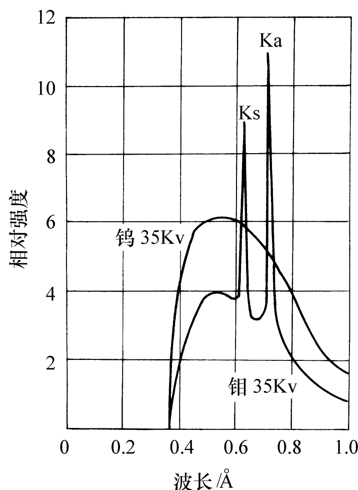
X 单位 X unit X 单位是一种长度单位，用以表示 X 射线的波长，符号为 X、XU 或 Xu，它是以方解石晶体解理面在 18°时的光栅常数 d_{18} 定义的。

$$d_{18}=3029.45\text{Xu},$$

$$1\text{Xu}\approx 1.00202\times 10^{-13}\text{m}=1.00202\times 10^{-3}\text{Å}$$

X 射线发射谱 X-ray emission spectrum X 射线的发射谱是发射出的 X 射线波长成分和强度成分的关系图。X 射线谱是由两部分构成的，一部分是连续谱，另一部分是具有个别波长的线状谱，这又称为标识谱，标识谱重叠在连续谱上。标识谱的波长决定于靶的材料，每一元素有一定波长的射线，所以这种谱成为这种元素的标识，故称为标识谱。

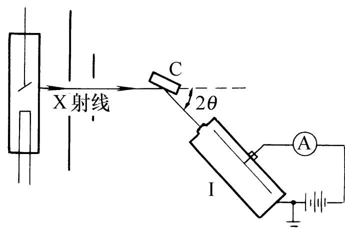
连续谱是电子在靶上被减速而产生的，标识谱是加速电子能量足够高而把原子内层电子



钨-钼的 X 射线谱图

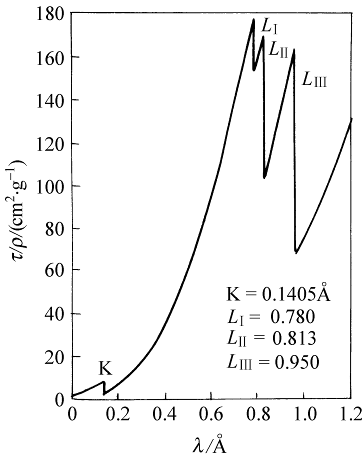
轰出原子之外，而邻近壳层电子跃迁过来，形成内壳层电子跃迁发出的谱线。

X 射线吸收谱 X-ray absorption spectrum 在 X 射线测谱计中，用电离室代替底片作为记录器。图中 C 是晶体，I 是电离室。如果在晶体和电离室之间放一块吸收物就可以测得 X 射线被吸收的情况。研究 X 射线的吸收谱可以得知：波长较短的射线贯穿本领高，当波长减到某一数值吸收突然增加，这些突然增加处称吸收限，吸收限表示能量足以使某个状态的电子电离，可以看到原子中的电子确实是分壳层的。吸收限对应于基态能级和各电离能级之间的跃迁。



X 射线测谱计

吸收限 absorption edge, absorption limit 若测出某物体对不同波长 X 射线的质量吸收系数，并以波长为横坐标，$\frac{\tau}{\rho}$（即质量吸收系数）为纵坐标，其中 ρ 是吸收物质的密度，τ 是吸收系数，即可得出一曲线。下图代表铅的质量吸收系数随波长的变化。从图可看出，吸收系数一般随波长的减少而降低，也就是波长较短的射线贯穿本领高，当波长减到某一数值，吸收系数突然增加。这些吸收突然增加处称吸收限。见“X 射线吸收谱”。



铅的质量吸收系数随波长的变化

L_I、L_{II}、L_{III}为铅的吸收限

布拉格定律 Bragg law 光可以通过衍射光栅来测量其波长，同样 X 射线也可以通过晶体这个天然的光栅来测量它的波长。因为 X 射线的波长很短，而晶体的间距正好在 X 射线波长同样的数量级。所以能满足测量的要求。

布拉格指出，只要满足：

$$2d\sin\theta = n\lambda \qquad n=1,2,3,\cdots$$

在 θ 方向射出的 X 射线即得到衍射加强，上面的公式称为布拉格公式。已知 d 可以测 λ，同样已知 λ 可以测 d，d 表示布拉格面之间的距离。

韧致辐射 braking radiation, bremsstrahlung X 射线中的连续谱是电子在靶上被减速而产生的；高速电子打到靶上，受靶中原子核的库仑场作用而速度骤减，电子的动能转成辐射能，放出射线，这种辐射称韧致辐射，也称碰撞辐射，或刹车辐射。

碰撞辐射 collision radiation 即韧致辐射。见“韧致辐射”。

特征辐射 characteristic radiation 特征辐射又称标识辐射，参见“X 射线发射谱”，在连续谱上叠加有两个尖峰，这就是特征辐射产生的 X 射线谱。各元素的特征 X 射线谱有相似的结构，故特征 X 射线被用来作为元素的标识。

同步辐射 synchrotron radiation 同步辐射是一种产生 X 射线的手段，带电粒子在加速运动中产生辐射，但加速运动可以是直线型的，也可以是圆周型的。圆周运动产生的辐射强度与带电粒子的质量四次方成反比。因此一般只有在对电子作圆周加速运动时，它产生的辐射才值得考虑。电子在同步回旋加速器（或其他圆型加速器）中作圆周运动时产生的辐射统称同步辐射。同步辐射的特点是功率大、能谱宽、方向性好

莫塞莱定律 Moseley law 是 1914 年英人莫塞莱（Henry Gwyn-Jeffreys Moseley）研究 X 射线时发现的。莫塞莱定律确立了标识谱线与发射元素原子序数间的关系，对各线系而言 $\nu = a(Z-b)^2$。ν 是标识辐射的频率，Z 是原子序数，a、b 是线系的常数。按此定律可从标识辐射的波长来确定靶元素的原子序数。

俄歇效应 Auger effect 1925 年法国物理学家俄歇（P. Auger）发现，当元素原子壳层中由 X 射线入射或其他方式产生空穴时，产生 X 射线是释放能量的一种方式，但另一种方式也可能是发射一个电子。如原子在 K 层中有个空穴，当 L 层的一个电子跃迁到 K 层时，多余的能量可以释放出 X 射线，也可以不释放 X 射线而把能量传给另一层（如 M 层）中的一个电子，这个电子就可以脱离原子并被称为俄歇电子。这些电子的动能与入射的 X 射线频率无关，只随被照射的原子而异，这种效应称为俄歇效应。

俄歇电子 Auger electron 见“俄歇效应”。

俄歇电子能谱 energy spectrum of Auger electron 因为俄歇电子的能量有特定的数值，且随元素而异，所以测出俄歇电子能量分布，也就是测出俄歇电子的能谱，就可以确定试样表面的组成，这种分析方法称俄歇电子能谱分析，简写为AES，对表面科学研究起很大作用。

康普顿效应 Compton effect 当X射线通过物质时逐渐减弱，这是由于被物质吸收和散射的缘故。X射线被散射后除了波长不变的部分外，还有波长变长的部分。这种现象由康普顿(A.H.Compton)在1922～1923年首先观察到并进行理论解释，称为康普顿效应。

康普顿波长 Compton wavelength 康普顿假定X射线由光子组成，其波长为λ，光子与原子中质量为m_0的相对自由而静止的电子碰撞，碰撞后在与入射方向成θ角的方向上测得波长λ'的散射波，电子在碰撞中受到反冲，根据体系的动量和能量守恒加上应用相对论的关系式(因光子是光速运动，故必须用相对论关系式)可得

$$\lambda'-\lambda=\Delta\lambda=\frac{h}{m_0 c}(1-\cos\theta)$$

h为普朗克常数、c为光速，m_0为电子静止质量。

这就是康普顿方程。

上式中的$\frac{h}{m_0 c}$是长度量纲，称电子的康普顿波长，其物理含义是：入射光子的能量与电子的静止能量相等时所相应的光子波长。

康普顿方程 Compton equation 见“康普顿波长”。

康普顿电子 Compton electron 康普顿电子又称反冲电子，一个$h\nu$能量的光子与“自由”电子碰撞，光子的能量减小为$h\nu'$，失去的能量$h\nu-h\nu'$传递给电子，此电子沿入射方向成φ角的方向运动，此电子称为康普顿电子。

反冲电子 recoil electron 见“康普顿电子”。

康普顿轮廓 Compton profile 康普顿方程是假定电子是自由的、静止的，实际上电子不是静止不动的。康普顿散射中散射的X射线谱的轮廓随元素Z而变化，反映了不同元素中电子运动状态是不一样的。这种X射线谱的轮廓称康普顿轮廓，它直接反映了物质内部的电子动量分布。

逆康普顿效应 converse Compton effect 康普顿效应是高能光子与低能电子相碰撞时，光子把它一部分能量传递给电子，从而损失能量变为低能量光子，波长变长。

逆康普顿效应是光子与高能量的相对论性电子相碰。此时情况与上述相反，高能量电子把一部分能量传递给低能量光子，光子获得能量，波长变短，这种现象称逆康普顿效应，由此产生的辐射称逆康普顿辐射。

谱线增宽 spectral line broadening 光谱线增宽的主要原因有三种，即：阻尼，多普勒效应和压强。当振子振荡而辐射时，它要丧失能量，因而振幅渐弱，所以它不能发射简谐波。由于辐射时不是静止的，多普勒效应使其频率改变。压强是周围原子对辐射原子施加影响，令其不能发出简谐波。

谱线宽度是由原子本身情况所决定，和光谱仪器完善与否无关，光谱仪器不可能完全理想，它还会对谱线再施加影响。若以频率为横坐标，光强度为纵坐标，则光强度以某一频率ν_0为中心(即极大值)，两边逐渐减弱，这种曲线称为谱线轮廓。对于每一个频率，曲线对应一个确定的值，这个值为谱线强度，谱线强度降低到最大强度的一半时的频率间隔定义为谱线的自然宽度。

谱线轮廓 profile of spectral line 见“谱线增宽”。

谱线强度 intensity of spectral line 见“谱线增宽”。

谱线自然宽度 natural width of spectral line 原子的能级除基态外，一般都是不稳定的，每一能级实际上总有一定的宽度，通常用能量最大值一半处对应的能量间隔来表示某能级的宽度，称能级自然宽度。由于能级有一定的宽度，产生的谱线也必然有一定的宽度，这就是谱线的自然宽度。

见“谱线增宽”。

五、分子物理学总论
General Introduction of Molecular Physics

分子物理学 molecular physics 物理学中研究物质结构中分子层次的分支学科，它研究分子的结构和物理性质以及分子间的相互作用，并在此基础上研究物质的气态、液态、固态的物理性质，特别是热学性质。

它研究分子结构时，不仅研究分子中原子的平衡几何配置，还研究分子中原子间的相互作用，即化学键。量子力学是研究化学键本质、分子物理性质和分子间相互作用的重要工具，可以根据量子化学（即分子的量子力学）原理，直接计算分子的能级、状态波函数等物理性质。还可借助于X射线衍射、中子衍射等技术直接测定分子的结构。

分子的性质与分子的结构紧密相关，可以通过研究分子的物理性质来确定其化学结构。例如测定分子的各种光谱就是研究分子结构的重要手段，而射频和微波波谱学、原子束和分子束、激光光谱等技术的应用，使相应光谱的精细结构和超精细结构能够非常精确地测量出来，从而测定核自旋、核的质量、核的电四极矩。测定分子的光电子能谱，也是研究分子物理性质的有效的实验方法。研究分子的物理性质还包括研究分子的电磁性质和热学性质等。

物质的气态、液态和固态都是大量分子的聚集态，也是分子物理学的研究对象。分子物理学还研究物质聚集状态的热学性质和其他性质，如物态方程、热力学函数、相平衡和相变、表面吸附以及扩散、热传导、黏滞性等输运现象。

分子 molecule 指物质中能够保持其一切化学性质不变而且相对稳定地独立存在的最小单元。分子由原子组成，原子间通过一定的相互作用力，按一定的方式结合成分子。单个原子构成的分子叫单原子分子，如惰性分子氦(He)、氖(Ne)、氩(Ar)等。分子由相同原子组成，称单质分子，如氢分子(H_2)、臭氧分子(O_3)。分子由不同原子组成，称化合物分子，如水分子(H_2O)由两个H原子和一个O原子组成。分子中的原子数目可以从一个到几十万个以上。

分子量 molecular weight 分子量是分子以碳单位为质量单位量度的分子质量，是分子中所有原子的元素原子量之和，同原子量一样，分子量也是一种相对质量，为无量纲数。例如，氧分子(O_2)由两个氧原子构成，以碳单位为质量单位，氧元素的原子量为15.9994，因此氧分子的分子量为$15.9994\times2=31.9988$。又如，氯化钠分子(NaCl)由一个钠原子和一个氯原子构成，钠元素的原子量为22.98977，氯元素的原子量为35.453，因此氯化钠分子的分子量为58.443。分子量的数值范围可以从氢分子(H_2)的2到成百上万，甚至到糖类分子的5×10^8。通常化学分子式表示化合物分子中原子的实际数目，由分子式算出的重量就是分子量。但某些大分子，其分子式仅给出各种原子的比例数，不是原子的实际数目，就不能按上述方法计算分子量。

分子的分子量也可通过实验测定，方法很多。其中质谱法最佳，用质谱仪测定，精度可高于分子质量数的万分之一。其他方法如测量晶体分子量的X射线衍射法；测定气体分子量的气体状态法；测定高分子分子量的溶液渗透压法等。

“分子量”现已改称“相对分子质量”。

克原子 gram atom “摩尔原子”的旧称，已废除。它表示一定质量的某种元素，单位为克，其数值等于该元素的原子量。例如：氢元素的原子量为1.00794，1克原子氢即是1.00794克的氢。1克原子任何元素含有的原子数都是6.0221367×10^{23}。见“摩尔”和“阿伏伽德罗常量”。

克分子 gram molecule “摩尔分子”的旧称，已废除。它表示一定质量的某种物质，单位为克，其数值等于该种物质的分子量。例如：氯化钠分子(NaCl)，分子量为58.443，则1克分子氯化钠即是58.443克氯化钠。1克分子任何物质含有分子数都是6.0221367×10^{23}。见

“摩尔”和“阿伏伽德罗常量”。

摩尔分子体积 molar volume 指1摩尔分子物质所占有的体积。它跟物质种类、物态、温度、压强、原子间距、分子间距、离子间距等有关。气态的摩尔分子体积最大，主要依赖于温度和压强。例如，在标准状况（0℃和1.0×10^5Pa）下，理想气体的摩尔分子体积为22.41410升，而各种实际气体的摩尔分子体积与此值上下相差约百分之几。随着温度升高，压强降低，气体的摩尔分子体积增大。液态和固态物质的摩尔分子体积主要依赖于其原子、分子或离子的间距，而与温度、压强关系不大。一般从液态变到固态，物质的摩尔分子体积减小约百分之几，但也有少数物质如硅、镓、锗、锑等，其摩尔分子体积反而增加。

双原子分子 diatomic molecule 泛指两个原子构成的分子，可为相同原子，如氢分子H_2，氮分子N_2等，称为同核双原子分子；也可为不同原子，如一氧化碳分子CO，HD分子（其中D为氘原子，氢的同位素），氯化钠分子NaCl等，称为异核双原子分子。

同核分子 homonuclear molecule 即同核双原子分子，指由两个相同原子构成的双原子分子，两个原子有相同的原子核，如氢分子H_2，氧分子O_2等。这类同核分子的电偶极矩$\mu=0$，因此反映在分子振动光谱上，观察不到它们的红外吸收光谱，但是，却可以观察到它们的拉曼散射光谱。

多原子分子 polyatomic molecule 泛指由两个以上的原子构成的分子。分子中的原子数目可以从几个、几十个到成千上万个。如水分子H_2O，由两个氢原子和一个氧原子构成。乙醇分子CH_3CH_2OH由两个碳原子、六个氢原子、一个氧原子构成。

原子分子团簇 atomic or molecular clusters 原子分子团簇是少数（几个至成千上万个）原子或分子聚合成的微小集团。它们的性质既与单个原子或分子不同，也跟凝聚态物质不同，它是介于物质气态和固态之间的新形态，有的称之为“物质第五态”。除了形成中性团簇外，还可形成带正、负电荷的团簇离子。任何元素都可以形成团簇和团簇离子。

团簇的结构具有特点，即像原子核中存在幻数一样，团簇中也存在幻数。当团簇中的原子或分子数n等于某些特定数字时，团簇的结构最为稳定，这些特定数字称为幻数。铅团簇的质谱实验发现团簇粒子Pb_7、Pb_{10}最稳定，这里$n=7$、10就是幻数。这时团簇粒子的能量最低，从而幻数团簇最稳定。近十多年发现的碳原子团簇，其幻数为3，11，15，19，60，70。这时团簇粒子的能量最低，从而幻数团簇最稳定。

团簇粒子的制备方法多种多样，可用惰性气体离子束轰击法、激光技术、电弧法产生各种团簇粒子，尤其是激光方法使用最为方便。已制备出原子数目n高达10^6的团簇X_n。

团簇的形成与原子周围环境效应紧密相关，因此研究原子分子团簇的形成、结构的性质及其变化的规律可以发展原子间力、分子间力、或离子与原子（分子）间力的理论，从而将原子分子物理学与凝聚态物理学连接起来，对于表面科学、材料科学、量子化学、化学反应动力学、环境科学等学科都有重要意义。1984年实验发现稳定的C_{60}团簇，具有中空的封闭球形笼状结构，直径0.71nm，称为富勒烯或富氏烯（fullerene），也叫布基球（Bucky-ball）。它是用电弧或激光在约2000℃的高温下产生的过饱和碳蒸汽与惰性气体分子（如He_2分子）碰撞而自发地形成。后又发现椭球状的稳定团簇C_{70}。

1990年制成由C_{60}团簇构成的固体为面心立方密堆积，团簇间由范德瓦尔斯力相结合，室温下晶格常数为1.417nm。1991年将C_{60}团簇固体掺碱金属后，发现在常温下具有金属电导性，低温下有超导电性：K_3C_{60}，Cs_3C_{60}，$RbCs_2C_{60}$的超导转变温度T_c分别为19K、30K、33K，是有机超导体中转变温度最高的。随后在C_{60}中添加碳原子，制成直径为纳米数量级的碳管称为碳纳米管或布基管（Bucky-tube），管壁厚度为几纳米，直径几到几十纳米，长度可达几十微米到几个毫米的微管。它具有异常导电性能，可做成具有整流作用的异质结和场效应三极管，在制作量子电子学器件方面迈出了坚实的一步。碳纳米管具有优异的力学性能，其强度可达钢的100倍，而比重只

有钢的1/6,最大延伸率可达20%,热稳定性也很好,可制成高强度的复合材料。

另外也用其他原子或分子制作出性能各具特色的团簇或团簇材料,如用金团簇做成一维、二维量子点阵排列;用 Al、Co、Fe、Mo、Ti、TiN 团簇做成薄膜,有巨磁阻效应;Ge、Si 团簇有发光增强现象;分子团簇 $(CO_2)_n$、$(H_2S)_n$ 等,可以预期,随着原子分子团簇研究的深入,必将制作出更多的性能优异的团簇和团簇材料,在更大的范围内获得应用。

准分子 excimer 指一类通过范德瓦尔斯键结合起来的双原子的分子系统,如惰性气体的卤化物分子 ArF、KrF、XeCl 以及 He_2、Ar_2、Ne_2、Xe_2、ArO 等。由于结合能很小(比室温下热能还小),基态在物理上、化学上均不稳定,在 10^{-12}～10^{-13}s 内自动解离成两个独立原子,但它们的许多电子激发态是共价键结合的稳定态,它们只能在激发态存在,这类分子称为准分子。当准分子从处于激发态的束缚分子向基态的自由原子跃迁时可以观察到它的发射光谱,已利用这一性质制造出高效率、高功率的惰性气体卤化物准分子激光器(也称激基分子激光器),例如 KrF 准分子激光器,工作介质是 Ar(90%)、Kr(9.5%)和 F_2(0.5%)的混合气体,采用高压大电流电子束或快速放电方法在混合气体中激发形成处于激发态的准分子,这个过程是原子、分子的一个复杂的电离与碰撞的过程。准分子激光器通常运行在紫色及紫外波段。准分子激光器的应用是多方位的,常用于光化学的研究,也可用于眼科手术,用它泵浦染料激光器,其峰值功率已达 10^7 瓦。开展对激发态的能级结构研究,将有助于开发出新型的准分子激光器。

分子电流 molecular current 分子中的电子进行绕核运动和自旋运动形成电流,分子中所有的电子运动形成的电流的总和通常可以用闭合的圆电流来等效地表示,这个闭合的圆电流叫做分子电流。见“分子磁体”。

分子磁体 molecular magnet 也称分子磁铁。分子中的电子作绕核运动和自旋运动,电子运动形成的电流在分子周围产生磁场,分子中所有的电子运动产生的磁场的总和,叫做分子磁场。可以用分子中一个闭合圆电流产生的磁场来等效地表示分子磁场,这个闭合圆电流就是分子电流。

分子磁体的磁矩为分子中所有电子的轨道磁矩与自旋磁矩的总和。

分子晶体 molecular crystal 指原子或分子间按范德瓦尔斯键(分子键)组成的晶体。在晶体阵点上的是分子或外电子层已饱和的原子,这些分子或原子是电中性的,仍保持孤立状态时的形状和性质。

分子晶体分为极性分子晶体与非极性分子晶体两大类,惰性原子如氖、氩、氪、氙等在低温下组成的晶体就是典型的非极性分子晶体,外电子层饱和的惰性原子结构稳定且是电中性的,但是在某一瞬间由于正、负电荷系中心不重合,原子出现瞬时电偶极矩,并在邻近原子中感应出诱导电偶极矩,从而在邻近原子间产生电的引力,使整个惰性原子系统结合成分子晶体。另外,有机化合物固体也是分子晶体。分子晶体中的结合力都是范德瓦尔斯力,很弱,因此分子晶体的硬度很小,熔点也很低。见“范德瓦尔斯力”和“范德瓦尔斯键”。

分子的离解能 dissociation energy of molecule 物理学中的分子离解能是指处于最低能态的一个分子分解成完全独立的原子时从外界吸收的最小能量。对双原子分子而言,只有一个化学键,分子离解能就等于这个化学键的键能或结合能。可将双原子分子的离解能 W_d 表示成 $W_d = |W| - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$,其中 W 为分子的电势能,由分子内部电荷分布决定;$\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ 为分子的零点振动能。作为双原子分子的氢分子 H_2 及其同位素分子 HD、D_2,其离解能分别为 4.478 00 eV、4.513 69 eV、4.556 18 eV,这是因为它们的电势能 W 相同,而零点振动能不同的缘故。根据同位素效应,折合质量小的分子,零点振动能较高,因此折合质量小的同位素分子,离解能较低。

对于由离子键构成的分子,也可分解成完全独立的离子,所需吸收的最小能量也叫分子的离解能,但跟上述离解能的含义不一样,而且量值更高。例如 NaCl 分子,分解为完全独立

的 Na 和 Cl 原子至少需要能量 3.58eV，而离解为完全独立的 Na^{+} 和 Cl^{-} 离子，所需能量却不少于 5.00eV，比前者高出近 40%。

化学中分子的离解能是按摩尔分子计量的，其定义为在大气压为 1×10^{5}Pa 和温度为 25℃的情况下 1 摩尔理想气态分子分解成完全独立的原子所需吸收的最小能量。化学中氢分子 H_2 的离解能为 4.362×10^{5}J/mol。双原子分子只有一个共价键，双原子分子的离解能就是 1 摩尔该分子中键能的总和。多原子分子有多个化学键，各个化学键的离解所需最小能量可能不同，因此多原子分子的离解能是 1 摩尔该分子中所有化学键离解所需最小能量的总和。例如氨分子 NH_3 中三个 N—H 键虽然等价，但由于离解的先后次序不同，所需要的最小能量也不同，按 1 摩尔分子计量，分别为 4.310×10^{5}、3.849×10^{5}、3.598×10^{5}J/mol，所以 NH_3 的离解能为三者之和：1.176×10^{6}J/mol。

分子运动论 kinetic theory of molecule 分子运动论是建立在物质结构的原子-分子论及经典力学和统计方法基础上的关于物质运动，特别是物质热运动的微观理论。它认为物质由大量作无规热运动的分子或原子组成，分子或原子之间有一定空隙，温度越高，运动越激烈。同时，分子或原子间存在相互作用力，这种力将物质中的分子或原子形成某种规则的分布，但分子或原子的热运动又要破坏这种规则分布。这两种对立作用的消长就造成了物质宏观状态的变化。

分子运动论以分子运动的集体行为成功地解释了气体的性质和行为。例如：用气体的大量分子碰撞容器壁的经典力学模型圆满地解释了气体对器壁压强的产生。用气体分子平均动能的增加解释了气体温度的升高。分子运动论还定性地揭示了气体的扩散、热传导、黏滞等输运过程的物理本质。分子运动论中证明的气体分子速度分布律也得到实验的证实。

但是分子运动论也存在欠缺。在运用统计方法中引入了不少纯粹力学的限制，如分子碰撞模型等，使得统计方法的运用不够严密。虽然它能解释单原子理想气体系统的热学性质，但对更一般的系统无能为力。这从而促使统计力学发展起来，在统计力学中尽量少作有关微粒性质的假设，尽量多用普遍的统计理论，在理论上更严谨，可以适用于处于平衡状态的各种不同系统。因此可以说：分子运动论是统计力学出现之前关于物质运动的微观理论。

分子动理（学理）论 kinetic theory of molecule，molecular kinetics 曾用名“分子运动论”，见“分子运动论”。

量子化学 quantum chemistry 量子化学是用量子力学原理研究分子的结构与性质和化学反应微观过程的科学，又称分子量子力学，是近代化学中一门理论性的基础学科。它也研究原子和晶体的电子层结构，无机、有机化合物和生物大分子以及各种功能材料的结构与性能的关系。

量子化学是从研究分子中电子和原子核的运动规律来认识化学问题的，它通过解薛定谔方程研究分子中化学键的本质。量子化学是从 1927 年海特勒（W. Heitler）和伦敦（F. London）研究氢分子的结构开始的。量子化学认为由于分子中原子核之间电子云重叠，出现电子云密度大的负电区，吸引两边带正电的原子核，从而形成化学键。后来又研究多原子分子。20 世纪 30 年代初建立了分子轨道理论，并从半经验的计算方法发展到半定量、定量的计算方法。20 世纪 60 年代以来，随着大型计算机的使用，量子化学从头计算法得到发展，广泛用于计算原子、分子、晶体的电子能级和电荷分布，为化学和相关学科提供了许多关于原子、分子、晶体的微观信息，促进了这些学科的发展，尤其是 20 世纪 70 年代以来，随着计算机图形学技术的发展，应用量子化学方法进行分子设计已成现实，并正在发展中。20 世纪 70 年代以来还发展了分子轨道对称守恒原理，使量子化学进入研究化学反应微观过程（包括催化过程）的阶段，不但能够解释还可预示许多化学反应过程。

分子轨道 molecular orbit 分子中的单电子的定态波函数称为分子轨道，也就是原子轨道的线性组合 LCAO（linear combination of atomic

orbitals)。

分子轨道的概念起源于早期双原子分子带状光谱的研究工作。将原子物理学中的玻恩-奥本海默(Born-Oppenheimer)近似和“轨道近似”方法移植到双原子分子的研究中。由于原子核质量大,比电子运动慢得多,因而可以将核看做固定不动,主要研究电子的运动,将电子的运动与核的运动分开,这就是玻恩-奥本海默近似。然后采用“轨道近似”方法把多电子问题化简为求解一个或一组近似的单电子波动方程,从而解得分子中的单电子的定态波函数,即分子轨道,其中不包括自旋波函数。经过几十年的发展,分子轨道理论已经发展成为量子化学中的一种系统理论。

多重散射 X_α 方法 multiple scattering X_α method 量子化学的分子轨道理论中最精确的计算方法是 LCAO 从头计算法,LCAO 为原子轨道的线性组合(linear combination of atomic orbitals)的缩写。这个方法就是求解所谓“自洽场”方程,计算工作量很大,需用大型计算机,使它的应用受到了制约。后来在从头计算法的基础上发展了 X_α 方法,它是对“自洽场”方程中的交换势能作了某种近似得到的。X_α 方法主要优点是计算时间大大节省,由于无需计算多中心积分,它的计算时间仅为 LCAO 从头计算法的百分之一,而且在物理上满足维里定理、费米统计。对立体构型的对称分子,电离能的计算值与实验值比较一致,它是研究某些复杂体系(如原子簇化合物,生物大分子、催化剂等)中电子运动的有效手段。

多重散射 X_α 方法是通过处理复杂的多原子的原子团簇问题来研究固体的性质。它的指导思想是在固体中选出一个原子团簇作为实际计算用的体系,当原子团簇中的原子数逐渐增加时,原子团簇的性质会逐渐接近固体的性质,以少数原子构成的原子团簇模型计算出来的电子结构来描述固体的性质,需要考虑固体的其余部分对原子团簇的影响,采用给原子团簇加上适当的边界条件的办法来代替这种影响。有人对原子数目多到 43 个 Al 原子的各种团簇和 71 个 C 原子的各种团簇用多重散射 X_α 方法进行过计算。多重散射 X_α 方法在半导体材料、固体中杂质和缺陷的研究以及在金属的电结构研究中有重要应用。由于在多重散射 X_α 方法中引进势场模型 muffin-tin(蛋糕模子)近似,会产生额外误差且使波函数的积分难以计算,另外对原子半径的选取对估算结果有较大影响,为了克服多重散射 X_α 方法的缺点,又发展了分立变分 X_α 方法、原子轨道线性组合的 X_α 方法,缺点克服了,但增加了计算工作量,因此在固体性质的研究中还需发展更有效的 X_α 方法。

分子设计 molecular design “分子设计”一词最早出现在 20 世纪 70 年代,但至今分子设计还未形成一门学科,也没有准确的定义。简单地说,分子设计就是运用一定的理论方法或实验数据设计出具有某种特定性质的分子。

通常讲的“分子设计”一词有三种含义。第一种含义是指利用计算机凭借经验或理论设计一种具有特定性能的以前没有合成过的分子。第二种含义是从分子、电子水平上通过大量实验数据的数据库结合现代的理论方法(包括量子力学)设计新的分子。第三种含义是根据具体需要,运用可靠的先进理论通过计算机图形学等技术设计出新类型的分子。三者都要利用计算机应用计算化学的方法设计分子。在第一、二种含义下的分子设计,设计出来的分子往往是已有分子的结构改造,第三种分子设计能获得全新结构类型的分子。随着计算机图形学技术从 20 世纪 70 年代后期以来的长足发展,分子设计也从萌芽到发展。但是由于分子多样,结构复杂,分子设计有很大的难度,尤其是无机物分子的设计,跟晶体中原子的占位、晶体缺陷、分子堆积等因素密切相关,设计的难度很大,有机大分子的设计也很困难。大分子设计目前主要集中在药物分子设计方面。

以药物分子设计为例,分子设计的过程是首先以对分子结构与性能关系的认识为基础,收集实验数据,确定分子中的药效团。其次运用一定的理论方法建立数学模型,进行定量计算,预测分子性能,改变分子局域结构,优化和调控分子性能。再次进行随机检验,以确保模型的可靠性。然后设计新分子,使新分子具有

某种特定的性能。以上步骤要多次反复,不断改进。最后,合成新分子并测试新分子的性能。

分子设计既有学术意义又有经济价值,不仅可以检验和发展有关的理论方法,深化对分子结构与性能关系的认识,而且能提高寻找具有特定性能分子的命中率,节省人力、财力,提高效益。若合成有机新分子,现在通常的做法是先用计算化学方法在计算机上进行分子设计,路走通了,再合成,可以少走弯路,节约成本。像常用消炎药氟哌酸就是这样设计出来的,1980 年开始生产,现在还在大量应用,产生了巨大的经济效益和社会效益。

分子设计与生命科学紧密相关,21 世纪是与生命科学有关的世纪,分子设计将会在 21 世纪中大显身手。

高聚物 high polymer 分子量在 10^4 以上的化合物称高分子化合物。常见的高分子化合物分子是由简单的结构单元通过共价键重复连接而成的长链状分子,这种高分子化合物又称聚合物。例如,聚氯乙烯分子就是由 n 个结构单元(又称重复单元)—CH_2CHCl—连接而成,结构单元的数目 n 称为聚合度,聚氯乙烯分子式记为 $\left[CH_2CHCl \right]_n$。n 很大,增减几个重复单元并不显著影响其物理性质的聚合物称为高聚物,如聚氯乙烯,n 高达 800～2400,就是高聚物。而 n 较小,增减几个重复单元会显著影响其物理性质的聚合物称为低聚物。简单地说,重复单元数目很大的高分子化合物叫做高聚物。由一种单位聚合而成的聚合物称为均聚物,如聚氯乙烯,聚乙烯,由两种以上单体共同聚合而成的称为共聚物,如氯乙烯-醋酸乙烯共聚物。

高聚物通常指有机高分子化合物,也有人工合成的无机高分子化合物。高聚物分子中的原子数可由几百个到几万个,高聚物的分子量可高达几万到几百万,甚至上千万。聚氯乙烯的分子量就达 5 万～15 万。高聚物常以单体名称命名,如聚氯乙烯、聚乙烯,或按结构特征命名,如聚酰胺、聚酯。

高聚物习惯上按性能和用途分成纤维、橡胶、塑料三大类,或从化学角度按主键的组成,将有机高聚物分成碳链、杂链和元素有机高聚物三大类,分别指分子主链完全由 C 原子组成,分子主链由 C、O、N、S 等多种原子组成,分子主链中没有 C 原子、但侧基中有 C 原子。另外,无机高分子化合物的分子主链和侧基中均无 C 原子。有机高分子按来源分天然的和合成的两大类,天然的有纤维素、淀粉、蛋白质、天然橡胶等;人工合成的有合成纤维,合成橡胶,合成塑料等,是由单体或低分子物质经聚合或缩聚反应合成的。

高聚物的物理性质跟分子量直接有关,例如当聚合度提高,分子量增大时,其熔点和沸点升高,密度和强度增大,溶解度减小,在保持浓度不变的情况下溶液的黏滞性增大。

高聚物有许多好的物理和化学性质。如一般都具有一定的强度和弹性,可用作固体和弹性体材料;具有很好的可塑性和延展性,容易制成纤维和薄膜以及形状复杂的制品;熔点或软化点的温度变化范围比较宽(5～15℃),蒸汽压极低,在达到沸点前,分子已分解,无气态可言;有机高分子化合物比重小,耐腐蚀,绝热,电绝缘好,减震;高聚物本体或溶液黏度特别大等。因此,高聚物在国民经济和日常生活中得到广泛应用,新的品种和类型不断出现,必将对科技发展和社会进步产生更为深远的影响。

高分子物理 polymer physics 分子量大于 10^4 的分子谓之高分子。通常的高分子是由许多(10^3～10^5 数量级)小分子单元键合而成的长链状的有机分子,即高聚物的分子。20 世纪 30 年代施陶丁格(H.Staudinger)建立了高分子学说,高分子科学从有机化学中独立出来,现已发展成为一门综合多种学科的边缘科学。高分子物理学是高分子科学的重要的分支学科。

高分子物理学是研究高聚物的结构与性能的关系及高分子运动规律的学科。高分子物理学既研究高聚物分子层次的分子链的近程结构和远程结构,也研究高聚物的聚集态结构如晶态、非晶态、多相体系结构。研究高聚物的各种物理状态如固态、黏流态等及这些状态之间的转变;研究高聚物的力学性能如高弹

性、黏弹性、屈服、断裂等和电学性能以及高分子溶液的性质等；研究高分子的运动，其特点是运动单元的多重性，运动对温度的依赖性，运动有松弛过程等。高分子物理学研究的内容较多，涉及的学科面较广，它是在基础物理学、物理化学、有机化学、材料力学和流体力学等基础上发展起来的一门综合性边缘学科。

高分子物理学研究高聚物的目的是弄清高聚物结构与性能之间的内在联系，掌握其一般规律，以便改进生产和加工方法，提高高聚物的性能，进而寻找性能更好的新型高聚物，使之更好地为人类服务。

高分子化学　polymer chemistry　高分子化学是研究高分子化合物的化学合成原理、化学结构与性能的关系以及化学反应的一门科学，是高分子科学的重要分支学科，它分为有机高分子化学与无机高分子化学，但以有机高分子化学为主。

高分子化学研究高分子化合物的结构，研究各种聚合方法的原理，如热聚合、光引发聚合、辐射聚合、溶液聚合、离子型聚合、定向聚合等的原理，研究各种聚合反应，如逐步聚合反应、连锁聚合反应、缩聚反应等，研究聚合物的各种化学反应，如聚合物的侧基官能团反应、接枝、交联、扩链反应、配位反应、降解反应、聚合物的老化等。通过这些研究，改进高分子化合物的合成方法，提高高分子化合物的性能，研制新的类型的性能更优越的高分子化合物。高分子化学在高分子材料、制药、生物工程等方面有着广泛的应用。

分子生物学　molecular biology　是从分子水平研究生命现象的新兴学科。具体地说，是利用各种物理和化学方法通过研究作为生物体物质基础的蛋白质、核酸等生物大分子的结构和功能及结构与功能的相互关系来认识生命现象的普遍规律。

实验证明，跟非生物一样，生物也是由原子和分子组成的，所以生命现象必然也是原子、分子间相互作用的结果。但是，生物大分子的分子量大，结构复杂，与非生物分子明显不同，必然有其独特的性质。自 20 世纪 50 年代后期以来，先后发现核酸的双螺旋结构，人工合成了蛋白质和核酸分子，测定了蛋白质、核酸的化学结构和空间结构，到近年的基因组测序以及基因重组技术、聚合酶链反应技术和生物芯片技术的发展，对生物大分子的结构与性能的关系有了更深入的了解，使生命科学发生深刻变化，从而产生和发展了分子细胞学、基因工程、生物芯片技术等新兴学科和生物技术，使人类对生命现象的本质及其普遍的运动、发展规律的认识越来越深入，越来越全面。分子生物学的发展不仅在工农业生产中有重要应用，也必将在人类自身的繁衍、医疗保健等方面发挥日益重要的作用，还将为生命起源的探索开辟新的道路。

生物大分子　large biological molecule　通常指生物体细胞内存在的蛋白质和核酸两类大分子。细胞中的物质大部分是蛋白质，小部分是核酸。每个生物大分子内有几千到几十万个原子，分子量从几万到几百万以上。生物大分子的结构很复杂，但其基本的结构单元并不复杂。蛋白质分子是由氨基酸分子以一定的顺序排列成的长链。氨基酸分子是大部分生命物质的组成材料，不同的氨基酸分子有好几十种。生物体内的各种酶就属于蛋白质，是生物体维持正常代谢功能所不可缺少的。

核酸以所含糖的不同分为核糖核酸（RNA）和脱氧核糖核酸（DNA）两大类，它们分别由 4 种核苷酸组成，而核苷酸由碱基、糖和磷酸组成，核酸分子是由核苷酸分子以一定的顺序排列成的长链。细胞中的核酸含量虽少，却决定着生物体的遗传功能。遗传信息就储存在脱氧核糖核酸的双螺旋长链结构中，但生物体要出现遗传性状还要依赖存在于细胞质内的核糖核酸的诱导作用。

原子操纵　atom manipulation　指按人的意志抓获、移动、安排一个个原子，从而构造出具有独特性质的各种物质，这又称原子分子工程，是著名物理学家费曼（Feynman）在 1959 年首先提出这一设想的。看“原子分子工程”。

原子分子工程　atomic and molecular technology　有两种含义，从广义上讲利用各种技术和方法，由各种元素原子合成出新的分子，制造出各种各样新的材料，都是原子分子工程。

从狭义上讲，原子分子工程就是按人的愿望进行单个原子或分子的测量、控制，或者说按人的意志安排一个个原子或分子，也即进行单原子操纵。这就是狭义意义上的原子分子工程。

要实现人工安排单个原子或分子必须解决四个问题：要在确定的时间内捕获特定的单个原子或分子；要探测和识别出这是何种原子或分子；将单个原子或分子提取并转移到指定的地点安置；将各个离子结合起来或分离出去，形成新的分子或器件。如果能够实现单原子测控就能用一个个原子构造出新的分子，或用不同材料的微粒构造出新的器件。也可以把分子或材料上的原子、分子一个个地取下来。这种美好愿望现在还不能完全实现。

扫描隧道显微镜的出现，使单个原子的移动成为可能。1990 年人类第一次实现了单原子的转移，美国 IBM 公司的科学家们用扫描隧道显微镜成功地移动了金属 Ni 表面上的 35 个 Xe 原子并组成了“IBM”三个字母。1993 年他们又用扫描隧道显微镜在 Cu 的表面将 48 个 Fe 原子移动形成量子空心围栏，这个围栏能将表面态电子禁锢在其内部。

单个原子的探测识别还未成功。有可能通过扫描隧道显微镜抓住原子，利用能谱测量技术，分析该原子的能谱来鉴别它的种类。估计用不了多久就能解决，这将使单原子的测控研究步入一个新的阶段。

六、分子结构
Molecular Structure

分子结构 molecular structure 关于分子中的原子或原子集团的化学键合方式和空间排列的学说。这种学说认为分子由原子组成，原子之间由于电的结合力而形成分子，原子之间的这种电结合叫做化学键合。分子中原子间常见的键合方式有离子键、共价键、金属键等几种，而实际分子中，原子之间的键合常常是这几种键合方式的混合。物质的分子结构直接决定它的物理和化学性质，研究物质的分子结构将能指导生产实践，探索应用领域。

极性分子 polar molecule 又称有极分子。即无外电场时，分子中正电荷系的中心与负电荷系的中心有一定距离的分子。它具有永电偶极矩，但在无外电场时，这些分子的电偶极矩随机地排列着，因而含有大量极性分子的任何宏观系统，其电偶极矩为零。

无极分子 non-polar molecule 即无外电场时，分子中正电荷系的中心与负电荷系的中心重合的分子。这样的分子没有永电极矩（电偶极矩、四极矩或多极矩），又称非极性分子。

化学键 chemical bond 在分子或晶体中，使原子与原子或分子与分子结合起来的电的作用力称为化学键。化学键形成时会放出能量，使分子或晶体处于能量更低的稳定状态，这种能量称为键能或结合能。化学键的强弱是以结合能的大小来衡量的。化学键可以理想地分成五种类型：离子键、共价键、金属键、范德瓦尔斯键和氢键。但是实际情况常常是其中某些类型的混合。前三种为强的化学键，其结合能为 3～5eV/原子，使原子与原子结合成分子或晶体；后两种为弱的化学键，其结合能为 10^{-2}～10^{-1}eV/原子，使分子与分子结合成晶体。

化学亲和势 chemical affinity 这是化学中的传统术语，指元素或化合物进行化学反应的能力。其意义不很明确，但一般认为化学亲和势是化学键产生的原因。量子力学出现后，认为化学亲和势实质上是分子中原子之间的电磁相互作用，而化学键是分子中各原子的电子云相互作用使之重新配置的结果。

离子键 ionic bond 正电性元素，其原子的价电子少，有失去价电子的趋势，如碱金属。而负电性元素，其原子的价电子多，有获得电子而使外层电子饱和的趋势，如卤素。当它们接近到一定程度时，前者失去电子，后者得到电子，分别成为正离子和负离子，正负离子之间由于库仑引力形成稳定的化学键，称为离子键。离子键化合物通常以晶体形式存在，在离子键作用下组成的晶体称为离子晶体。在实际的离子键化合物中常混有百分之几的共价键。NaCl 晶体是典型的离子晶体，具有纯粹的

离子键,晶体中只有正离子 Na^+和负离子 Cl^-,不存在单个的分子。由于库仑力是长程力,各个离子都受到晶体中所有其他离子的作用,因而离子键没有方向性和饱和性。在 NaCl 晶体中每个钠离子 Na^+周围有 6 个氯离子 Cl^-,同样,每个氯离子 Cl^-周围有 6 个钠离子 Na^+,Na^+与 Cl^-在空间以同样的方式相间排列,组成的晶体是电中性的。

离子键的强弱可用离子晶体的结合能或晶格能的高低来衡量。完全独立的原子结合成最低能态的离子晶体时,释放出来的能量称为结合能。而处于最低能态的离子晶体离解为完全独立的正负离子时,从外界吸取的最小能量叫做晶格能,两者都为 eV 数量级,但后者比前者高,如 NaCl 晶体,结合能为 3.3eV/原子(75kcal/mol),晶格能在 5.0eV/原子(115kcal/mol)以上。结合能或晶格能越高,离子键就越强、越牢固。由于离子晶体的结合能较高,在 3～5eV/原子,离子键比较强,因而离子晶体具有较高的硬度、熔点和沸点。

共价键 covalent bond 也称原子键。主要是指由两个原子通过共同拥有的价电子对而形成的一种化学键,每一对共有价电子对形成一个共价键。两个相同原子可以形成共价键,如氢分子中,两个 H 原子共有一对价电子,结合能为 4.49eV/原子(103kcal/mol),电子对为二原子均衡共有,称为非极性共价键。两个不同原子也可以形成共价键,如水分子 H_2O 中,形成两个 H—O 共价键,O 原子与每个 H 原子共有一对价电子,但电子对偏向一边,称为极性共价键,每个 H—O 键的结合能为 4.8eV/原子(110kcal/mol·bond)。极性共价键含有离子键的成分,当极性键的极性无限增强时,电子对脱离一个原子,而为另一原子所独有,于是共价键过渡为离子键。共价键是原子结合成分子的最普遍形式。

关于共价键的本质,量子力学的解释是:两个原子各有一个自旋相反的价电子,当它们接近时,其电子云发生重叠,在两个原子核之间出现一个电子云密度大的区域,使整个体系能量降低。电子云是带负电的,同时吸引两边带正电的原子核,从而形成稳固的化学键。

共价键跟离子键不同,具有饱和性和方向性。饱和性即指一个原子只能形成一定数目的共价键,它决定于该原子的价电子数。如氢原子是一个,氧原子是两个,碳原子是四个。方向性是指原子只能在特定方向上形成共价键,这就是使电子云能尽量重叠的方向。如在水分子中两个 H—O 共价键的夹角是 104.5°。

根据成键方式的不同,共价键可分为 σ 键和 π 键两种,σ 键是指沿键轴(二原子核的连线)方向电子云以“头碰头”方式发生重叠的键;π 键是指在垂直于键轴方向电子云侧面发生重叠的键。单键一般都是 σ 键,双键或三键中有一个 σ 键,其他为 π 键。σ 键的重叠程度高,而 π 键电子能量较高,因此,双键和三键化合物都比较活泼。

原子通过共价键也可以结合成晶体,称为原子晶体或共价晶体,如金刚石(C),金刚砂(SiC)等,金刚石中 C 原子间的共价键呈四面体结构,均是 σ 键,很强,结合能高达 7.37eV/原子(169.5kcal/mol),因而金刚石是最硬的固体,而且熔点高(3280K),导电性能差,为良好的绝缘体。

以上的共价键理论是“电子配对法”,也称“价键法”。

除了上述的两个原子之间的共价键外,在多个原子之间也可共有一些电子,形成多原子共价键。

金属键 metallic bond 指金属原子间依靠自由运动的共有电子相互结合的键。其物理图像是:金属原子都是价电子少的原子,易失去价电子,变成正离子。正离子排列在金属晶体的阵点上,脱离原子的价电子为整个晶体所共有,在晶体中自由转移和流动,形成负电子云,正离子与负电子云之间的库仑引力使金属原子结合在一起,形成金属键。金属键无方向性,原子堆积方式只要求密堆积,以使势能最低,结合最稳定,因而大多数金属为面心立方密堆、六角密堆或体心立方密堆结构。

从共有电子来看,金属键实质上也是一种共价键,但由于共有的电子少,是不饱和共价键,使其结合能比完全的共价键要低,从而有良好的延展性、导电性、导热性,升华温度也较低。

原子键 atomic bond 即共价键，看"共价键"。

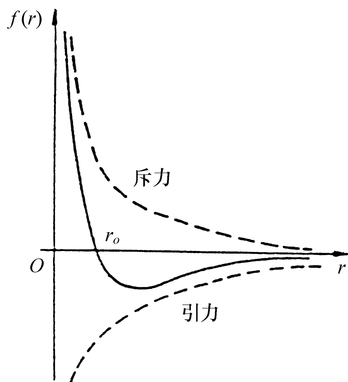
分子键 molecular bond 即范德瓦尔斯键，看"范德瓦尔斯键"。

分子间力 intermolecular force 指分子与分子之间的相互作用力，也称分子力。由于组成分子的原子中含有带正电的原子核和核外带负电的电子，电子绕核运动，形成电子云。当二分子比较接近时，一个分子被另一分子的不断变化的电偶极矩所极化，从而产生电的吸引力，这时分子力主要表现为引力。当二分子非常接近时，分子外层电子云发生重叠，从而产生电的排斥力，分子间距离越近，排斥力越大，这时分子力主要表现为斥力。

分子间的相互作用非常复杂，为了便于处理问题，常常利用一些简化模型。例如：假设分子间相互作用力是球对称的，则可以用如下的半经验公式来近似地表示：

$$f(r) = \frac{\lambda}{r^s} - \frac{\mu}{r^t} \qquad (s > t)$$

其中，r 为两个分子中心之间的距离，λ、μ、s、t 为正的常数，需由实验确定，通常 $9 < s < 15$，$4 < t < 7$。第一项为正，代表斥力；第二项为负，代表引力。由于 s、t 均比较大，因此，分子间的斥力和引力随着分子间距离 r 的增大都迅速地减小，具有这种性质的力称为短程力。对于短程力，可以认为存在一个有效作用距离，



两个分子间的力与距离的关系曲线

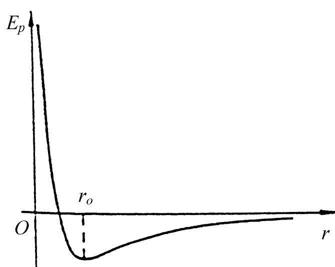
当 r 超出有效作用距离时，短程力完全可以忽略。又因为，$s > t$，所以斥力的有效作用距离比引力小。两个分子间的力随 r 的变化曲线如左栏图，上下虚线分别代表斥力和引力，实线代表合力 $f(r)$。当合力 $f(r) = 0$ 时，引力与斥力相互抵消，这时 $r = r_0 = \sqrt[s-t]{\lambda/\mu}$，$r_0$ 称为平衡位置。$r < r_0$ 处，分子力 $f(r)$ 为斥力；$r > r_0$ 处，分子力 $f(r)$ 为引力。

也可用分子间的势能曲线描写分子间的相互作用。假设两个分子间的距离为无穷远时，分子间的势能 $E_p = 0$，由于分子力为保守力，当两个分子间距离从 $\infty \to r$ 时，分子力所做的功的负值就是距离为 r 处的势能，即

$$E_p = -\int_{\infty}^{r} f(r)\,\mathrm{d}r = \frac{\lambda'}{r^{s-1}} - \frac{\mu'}{r^{t-1}}$$

其中，$\lambda' = \lambda/s-1$，$\mu' = \mu/t-1$。

势能曲线如下图所示。在平衡位置 $r = r_0$ 处，分子力 $f = 0$，势能取极小值。在平衡位置 $r = r_0$ 附近，分子的动能小于势能的绝对值，分子总能量为负值，这时分子不能自由移动，只能在平衡位置附近做小振动，物质处于液态或固态。在 $r < r_0$ 处，势能曲线很陡，其斜率取负值，为强的斥力作用区。在 $r > r_0$ 处，曲线斜率取正值，为引力作用区。



两个分子间的势能与距离的关系曲线

范德瓦尔斯力 van der Waals force 指外电子层已饱和的中性原子（如惰性原子氖、氩、氪、氙）或中性分子之间的相互作用力，其本质是由于电的相互感应，引起原子或分子极化，从而在它们之间产生电的吸引力，这种吸引力

的产生有三种情况：

(1) 极性分子具有永电偶极矩，通常这些偶极矩杂乱无章地排列，因而极性分子是电中性的，但只要这些偶极矩排列恰当，极性分子之间就会产生电的吸引力，这时电偶极子间的静电力也称葛生(Keesen)力。

(2) 无极分子中正负电荷系的中心重合，分子不具有永矩(电偶极矩、四极矩或多极矩)，但当极性分子靠近它时，可使它的正负电荷分开，产生诱导电偶极矩，从而(在极性分子与无极分子之间)产生电的吸引力，这种因诱导电偶极矩产生的吸引力称为诱导力，也称德拜(Debye)力。

(3) 原子或无极分子中正负电荷系的中心重合，应该没有电的吸引力，但是由于量子涨落效应，某一瞬间正、负电荷系中心不重合，呈现出瞬时的电偶极矩，而瞬时电偶极矩又会在邻近的原子或分子中产生诱导电偶极矩，从而使原子或分子之间产生电的吸引力。这种瞬时电偶极矩与诱导电偶极矩之间的吸引力称为色散力，也称伦敦(London)力。

因此，具体地说，范德瓦尔斯力就是原子或分子之间的偶极子的静电力、诱导力、色散力三者的统称。跟离子间的库仑引力及原子间的共价力相比，中性原子或中性分子间的范德瓦尔斯力要弱得多。

范德瓦尔斯键 van der Waals bond 也称分子键。指原子或分子之间赖以结合的范德瓦尔斯力，也即外电子层已饱和的中性原子或中性分子之间的相互作用力。范德瓦尔斯键出现在由原子或分子组成的晶体中，在这种晶体的阵点上原子或分子仍保持孤立状态时的形状和性质。例如惰性元素氖、氩、氪、氙的熔点很低，分别为24K、84K、117K、161K，在熔点以下其原子通过范德瓦尔斯键结合成晶体，氩的范德瓦尔斯键的结合能是0.088eV/原子(2.02kcal/mol)。

氢键 hydrogen bond 指氢原子参与的一种特殊类型的化学键，即氢原子可以同时和两个负电性很强而原子半径较小的原子X、Y(如O、H、F原子)相结合，结合的形式为X—H——Y，其中X—H键较短、较强，为共价键，而H——Y键较长、较弱，称为氢键，也有的称整个结合X—H——Y为氢键。

这是由于H原子与负电性很强的X原子形成共价键后，电子偏向X原子，X原子带负电，H原子带正电，产生一定的偶极性，从而使H原子可以跟另一负电性很强的Y原子结合，形成氢键。因此氢键本质上也是范德瓦尔斯键。

例如：冰(H_2O)就是由氢键构成的六角晶系的晶体。每个H原子不但跟一个O原子形成共价键，还与另一O原子形成氢键。O原子组成四面体，结构很空旷，因此，冰的密度小。当冰融化成水时，空旷结构解体，原子堆积程度提高，水的密度比冰大。0℃的水中保留下来的氢键约85%，20℃时，水中氢键约保留50%，至沸点时仍保留有相当数目。随着温度升高，一方面氢键不断减少，使水的体积逐步减小，另一方面，水分子热运动渐趋剧烈，又使水的体积逐步增大，最终导致水的特殊的热学性质：0—4℃范围内，不是热胀冷缩，而是热缩冷胀，4℃时水的密度最大。而且水的比热和汽化热都很高，这都是水中存在氢键决定的。氢键的结合能与范德瓦尔斯键同数量级，如冰中氢键的结合能为0.20eV/原子(4.5kcal/mol·bond)。

氢键在生命过程中是必不可少的。它控制着从水到DNA之类物质的性质，它对生物分子的结构和形成起着关键的作用。例如，生物分子掺了以氢键起作用的电子受体后，可以显示半导体性质，而半导体性对细胞间的联络及细胞增殖的控制是非常重要的。

分子缔合 molecular association 同种或异种分子在分子间力的作用下形成双分子或多分子的缔合体称为分子缔合。所谓缔合体常常是非固定的分子结合体，可以不断地解离和重新缔合。在分子缔合中起作用的分子间力主要是极性分子之间的库仑引力，尤其是氢键，这是指一个氢原子同时跟两个负电性很强的原子相结合形成的键(见“氢键”)。

例如，冰是水分子(H_2O)以氢键构成的晶体。冰融化为水后，氢键并未完全破坏，0℃时氢键保留约85%，20℃时保留约50%。水中存在着通过氢键缔合起来的水分子缔合体$(H_2O)_n$，n是缔合体中水分子的数目，n越大，缔合程

度越高。这种缔合体在水中不断解离与再生，处于动态平衡之中。随着温度上升，缔合度下降，通过实验测估：0℃时缔合体中平均水分子数 $n=130$，20℃时 $n=90$，72℃时 $n=60$。水的缔合作用决定了水的一些重要性质，例如由于水分子间的氢键较强，因此常温下水为液体，而周期表中氧周围元素的氢化物 CH_4、NH_3、PH_3、H_2S、HCl 等在常温下均为气体。水分子缔合体处于动态平衡中，因此水中 H^+、OH^-等离子有很高的迁移率。

水分子与氨分子也可形成异种分子的缔合体。在某些特殊情况下，缔合作用也可在一定程度上向化学键过渡。如 4∶1 的尿素与氟硅酸的加合物$[(NH_3)_2CO—H^+—OC(NH_2)_2]_2 \cdot [SiF_6^{2-}]$，其中 $O—H^+—O$ 为对称氢键，比一般非对称氢键 O—H——O 强得多，这已包含一定化学键的成分，不妨称这种缔合体为缔合分子。

分子缔合本质上属于物理作用，因此分子缔合并不显著改变原来分子的化学性质，但对其物理性质如密度、熔点、沸点、蒸发热等有明显的影响。

范德瓦尔斯分子 van der Waals molecule 指由范德瓦尔斯力连接着的一种弱键分子，即外电子层已饱和的中性原子或中性分子之间通过范德瓦尔斯力相互结合构成的一种分子，例如，氩原子连接到多种原子上形成的分子，氢分子、氢氟酸分子的二聚物$(H_2)_2$、$(HF)_2$以及 HF—ClF 分子等。对范德瓦尔斯分子的研究可以促进对包括液体、固体在内的分子结构和化学反应的理解。

里德伯分子 Rydberg molecule 分子的一个价电子被激发到远离分子中心的轨道上，并围绕整个分子中心运动，这种高激发电子态叫做分子的里德伯态，处于这种高激发电子态的分子叫做里德伯分子。

去掉一个价电子的分子叫做分子实，带正电荷$+e$。里德伯分子可以近似地看做一个电子在电荷为$+e$的分子实的库仑场中运动，即为“类氢原子”，其性质可用类氢原子有关公式来近似地研究。但是跟类氢原子又有偏离，这是因为分子实不是点电荷，为非球形形状，可以极化，分子中还有核的振动和转动，而且核的运动往往比电子运动还快，因此里德伯分子有独特的性质。

研究分子里德伯态的有效方法是量子亏损理论，可以计算里德伯能级。由于分子的高振动态和分子的化学反应关系密切，这方面的研究十分活跃，涉及简正振动模式之间的强耦合，原有理论已不适用，正在发展的有局域模振动等理论，实验方面也发展了受激辐射泵浦、光学双共振、微波-光学双共振等研究方法。

研究里德伯分子具有良好的应用前景，例如有可能利用分子里德伯态获得激光输出；利用里德伯分子易于电离的特性分离杂质分子等。

特殊分子 special molecule 指分子中的一些新颖种类，如分子离子、范德瓦尔斯分子、氢键分子、里德伯分子、长程分子、金属团簇分子、亚分子等。对它们的研究提供了了解分子结构、分子能级、化学动力学、化学过程的绝好机会，既有学术意义，又有应用价值。

分子离子即失去或得到电子的分子，是一种短寿命的高活性分子，在溶液化学、天体化学、等离子体、火焰中起关键作用，可用超声分子束产生并研究它们，对正分子离子束如 H_2^+、HD^+等可用超精细红外光谱法进行研究。研究分子离子对了解化学动力学、控制化学过程很有意义。

奇特分子 exotic molecule 普通原子中的一个电子被其他带负电的粒子，如 μ^-、π^-等代替；或是原子核中的一个质子被其他带正电的粒子，如 e^+、μ^+等代替而组成的分子。

七、分子光谱
Molecular Spectrum

分子的振动 vibration of molecule 分子中原子核的相对振动。分子处于确定的电子态并忽略分子的转动，就是纯振动的情况。

分子的振动能级 vibrational energy level of molecule 分子有 $3N-6$ 种简正振动（N 为分子所含原子数），分子的振动能量是各简正振

动能量之和。简正振动能量的量子化形成了分子的振动能级。

振动量子数 vibrational quantum number 分子有 3N－6 个简正振动量子数，每个简正振动量子数可取 0，1，2，… 等值。

高激发态分子 high excited molecule 分子中的电子运动，分子的振动和转动被激发到高能态的分子。

分子的转动 rotation of molecule 忽略核振动和电子运动对转动的影响，可得到整个分子的纯转动的情况。

分子的转动能级 rotation energy level of molecule 分子的转动能量首先假定分子是刚性的，然后考虑实际分子的非刚性和其他修正。双原子分子和线性分子转动能量可用非刚性转子模型计算；多原子分子转动视其转动惯量球的对称性，分为球形陀螺，对称陀螺（长，扁），不对称陀螺分别计算。量子化的分子转动能量形成分子的转动能级。

转动量子数 rotational quantum number 分子的转动能量的量子化通过转动量子数 J 体现，J＝0，1，2，…。

分子光谱 molecular spectrum 分子内的电子总是处于一定的运动状态，同时分子中还存在着各原子核的相对振动以及整个分子的转动。与这些运动形态相应的电子能级、振动和转动能级，形成了特征的分子能级图，符合跃迁选择定则的能级间的跃迁形成特征的分子光谱。

分子发射光谱 molecular emission spectrum 处于激发态的分子跃迁回到基态或较低激发态时产生辐射，辐射强度按频率或波长分布的集合就是发射光谱。

分子吸收光谱 molecular absorption spectrum 处于基态和低激发态的分子吸收连续辐射后，将跃迁到各高激发态，从而形成按波长排列的暗线和暗带组成的光谱称为分子的吸收光谱。

分子的转动光谱 molecular rotational spectrum 符合跃迁选择定则的转动能级间的跃迁形成特征的分子的转动光谱。分子的转动光谱是由极性分子的偶极矩跃迁产生的，等电荷核双原子分子（例如 HD 分子）、同核双原子分子（例如 O_2 分子）和球形陀螺分子（例如 CCl_4 分子）偶极矩为零，因此没有转动谱。纯转动光谱通常位于远红外和微波区。

分子的振动光谱 molecular vibrational spectrum 分子处于确定的电子态并忽略分子的转动，就是纯振动的情况。符合跃迁选择定则的纯振动能级间的跃迁形成特征的分子的振动光谱。振动能级间的跃迁通常伴随有转动能级间的跃迁。

分子的振动-转动光谱 molecular vibration-rotation spectrum 实际分子的振动总是伴随着转动，使振动光谱具有转动结构，称为分子的振动-转动光谱。分子的振动-转动光谱通常位于近红外区。

分子的电子光谱 molecular electronic spectrum 研究多原子分子电子态时，一般采用玻恩-奥本海默近似，把分子中的电子运动和分子振动和转动分开。由分子中的电子按最低能量状态填充时的组态可以得知分子的基态。电子激发后可以形成一系列激发态。每个电子态内还包含许多振动态和转动态。分子可以激发到可能的电子-振动-转动能级，形成位于真空紫外、紫外和可见光区的电子带系光谱。

光电子能谱 photo-electronic energy spectrum 光电效应中产生的光电子的能量分布谱。

分子的拉曼光谱 molecular Raman spectrum 当频率为 ν_0 的入射光通过分子介质时，散射光谱中不仅有与入射频率相同的成分，还有对称分布在入射频率两侧的成对的拉曼散射谱线：$\nu=\nu_0\pm\nu_R$，这些散射线（或带）合起来就构成散射系统的拉曼光谱，它是由散射系统的性质决定的，其中 ν_R 称为拉曼频率，$\nu_R=\Delta E/h$，ΔE 为分子内部两个允许状态之间的能量差，h 为普朗克常数。分子无论处于气态，液态或是由固态，只要满足适当的条件都可以产生拉曼散射。

分子的超精细光谱 molecular hyperfine spectrum 超精细结构主要来自原子核的磁矩、核的电四极矩，它们与电子的相互作用使得分子能级分裂成若干超精细能级，从而在能

级跃迁时形成分子的超精细光谱。

分子的激光诱导荧光光谱 molecular fluorescence spectrum induced by laser 在常温、常压下不能进行但在激光的照射下可被诱导的化学反应被称为激光诱导化学反应。在分子束中利用激光诱导可得到某些自由基碎片，通过激光诱导荧光方法可以得到自由基的光谱及自由基各内部自由度的能量分布。

超声分子束光谱 supersonic molecular beams spectrum 将超声分子束用于分子光谱测量所得到的光谱。

无多普勒效应的激光光谱 Doppler-free laser spectrum 使原子或分子束与激光束垂直，可以得到无多普勒变宽的激光光谱。

相干暂态光谱 coherent optical transients spectrum 原子或分子在外界入射激光共振光场作用下产生感应振荡电偶极矩，从而在其弛豫时间内形成相干暂态光谱，也称相干瞬态光谱。

分子光谱的同位素移动 isotope shift of molecular spectrum 由于原子核的结构不同，同一元素的不同同位素的原子能级重心的位置(即不计超精细分裂的位置)有微小的相对移动。反映到分子发射和吸收光谱上，不同同位素的不计及超精细分裂时的谱线频率也有一个相对位移，这就是分子光谱的同位素移动。

弗兰克-康登原理 Frank-Condon principle 解释分子电子光谱带振动结构强度分布的基本原理。主要内容是分子中的电子跃迁远比分子振动迅速，电子跃迁后的一瞬间，分子内原子核的相对距离和速度几乎与跃迁前完全一样。

分子光谱学实验方法 experimental methods in molecular spectroscopy 获得分子光谱数据的实验技术和方法。光谱数据通常是指光谱线的波长、轮廓、强度、偏振以及谱线强度随时间变化的数据。实验方法分为发射光谱法、吸收光谱法和散射光谱法。

分子束 molecular beam 在高真空中定向运动的分子流。

极隧射线 canal ray 气体放电管里从阴极孔中穿出的快速带电原子或分子流。

阴极射线 cathode ray 从放电管阴极发射出来的电子束。

分子的激发 molecular excitation 把分子内的电子运动、分子的振动和转动激发到更高的能态。激发方式包括热、电子碰撞、光、化学能、能量转移、粒子束的作用。

八、射频和微波波谱学
Radio and Microwave Spectroscopy

射频和微波波谱学 radio and microwave spectroscopy 通过射频或微波电磁场与物质的共振相互作用，研究物质的性质、结构和运动学的分支学科，简称波谱学。

电子顺磁共振 electron paramagnetic resonance 放置在恒磁场中的电子顺磁性物质与射频电磁波相互作用时，在顺磁性粒子的磁能级间出现的共振跃迁以及与之相联系的一些现象。

核磁共振 nuclear magnetic resonance 在恒磁场中，磁矩不为零的原子核受射频场的激励，发生磁能级间共振跃迁的现象。

核电四极矩共振 nuclear electric quadrupole resonance 凡自旋大于 1/2 的核均具有核的电四极矩，这类原子核受电磁波激励，电磁波频率与原子核处不均匀电场相互作用的能级间的跃迁频率相近时产生的共振现象。

光磁共振 opto-magnetic resonance 原子、分子的光学频率的共振与射电或微波频率的磁共振同时发生的双共振现象。

双共振 double resonance 同一体系中的两个不同的共振都被激发起来的现象。

微波受激发射放大 microwave amplification by stimulated emission of radiation 高低两能级的粒子布居数产生反转的原子(或分子，离子等)系统受微波辐射场的激励时，受激态原子作共振发射跃迁，所造成的入射微波的放大。其缩写为 MASER。

量子频率标准 quantum-frequency standard 以原子(或分子、离子等)的吸收或发射谱线为基准的频率稳定的信号源作为测量频率和时间的标准，简称量子频标或原子频标。

九、分子碰撞
Molecular Collision

电子-分子碰撞 electron-molecule collisions 由于分子中振动和转动能级间隔很小，电子与分子碰撞除了引起电子激发外，很容易引起振动和转动激发，是研究分子的一个重要的手段。

分子动力学 molecular dynamics 指研究分子碰撞过程的动力学。当研究化学反应中反应粒子之间相互作用的规律，如碰撞截面、能量转移、电荷转移、滞留时间及散射方向等，称为化学反应动力学，反应粒子之间相互作用的势能曲面决定反应能否发生，以及从反应物初态到产物末态的具体运动途径。许多情况下，用现代量子化学方法可以算得势能曲面，从而可以预言化学反应率及化学反应详细的动力学过程。原子分子碰撞动力学已经很难和分子反应动力学完全分开。

态-态碰撞 state-to-state collisions 在碰撞过程中，能量从一个原子或一个分子转移到另一个分子上。如果体系初态和末态的所有量子数都能测得，这种碰撞就称为态-态碰撞。对态-态碰撞能够提供比较清晰的描述，可以将理论与实验进行全面的比较，进一步修正理论。对激发态原子分子间的碰撞。通常的激发态粒子寿命较短，难以及时碰撞，但亚稳态或里德伯态的原子或分子能有足够的自发辐射寿命持续到发生碰撞。

辐射碰撞 radiative collisions 碰撞过程中能量以辐射形式发射出来，例如 $C^+ + H \longrightarrow CH^+ + h\nu$。

十、原子和分子的电离
Ionization of Atoms and Molecules

离子 ion 原子(或分子)失去一个或多个电子成为带正电荷的系统，称为正离子；相反，有一个或多个附加电子的原子称为负离子。正离子和负离子统称为离子。

离子实 ion core 在金属中原子外层的价电子脱离原来的原子，而失去价电子的原子被称为离子实。

负离子 negative ion 见“离子”。

离子束 ion beam 以近似一致的速度沿几乎同一方向运动的一群离子。

彭宁效应 Penning effect 当一种气体的亚稳原子同另一种气体的原子或分子碰撞时，即使它们的动能较低，只要前者的激发能大于后者的电离能，后者将被电离，前者则返回基态。多余的能量就转变为电子的动能或使离子激发。这种过程称为彭宁效应。

光致电离 photo ionization 当光子的能量等于或大于原子电离能时就产生光致电离。

自电离 auto-ionization 原子受电子碰撞或吸收光子时可能有两个电子同时被激发，形成所谓双重激发原子，若它的总激发能大于原子的电离能，则一个电子可能返回基态，另一个电子将脱离原子成为自由电子。这种过程称为自电离。

电荷转移 charge transfer 正离子与中性原子碰撞时发生的电荷转移过程。这时，正离子将俘获原子中的一个价电子而成为原子；原子则因失去一个价电子而成为正离子。

复合 recombination 气体中正离子同自由电子或负离子碰撞时俘获电子形成中性原子或分子的过程。前者称为电子-离子复合；后者称为离子-离子复合。

电子俘获 electron capture 一般分为两类，一类是原子或离子通过媒质时获得电子的机制；另一类是电子被原子核俘获，称为电子的核俘获或 K 俘获，即原子核从最靠近它的 K 电子壳层俘获一个电子。

Electrodynamics
电动力学

电动力学 electrodynamics 电动力学是研究电磁现象的基本规律、电磁场的基本属性和它与带电物质相互作用的学科。通常所说的电动力学,是指宏观的经典电动力学,是从研究和总结宏观电磁现象中发展起来的。在宏观情形下,电磁场的运动表现为波动性,原则上宏观电动力学并不能正确处理微观尺度的电磁现象,因为在微观尺度下,电磁场表现出粒子性,而荷电粒子则显现波动性。只有当粒子的波动行为不显著,电磁场主要表现为波动性时,经典电动力学才能适用。自 20 世纪初叶通过对微观客体的研究发展了量子力学,进而研究电磁场与微观带电粒子的相互作用,发展了量子电动力学,现在量子电动力学已成为近代理论物理的基础。用宏观电动力学处理微观电磁现象虽有局限性,但对某些问题所得到的结果与量子电动力学的结果存在一定的对应性,仍然可提供有益的启示,参见“量子电动力学”。

量子电动力学 quantum electrodynamics 量子电动力学是研究电磁场的微观属性,及其与微观带电粒子相互作用的学科。量子电动力学中,电磁场具有粒子性。粒子则呈现波动性,电磁场连续统可表示为各种频率的单色波模式,量子化后每一模式对应于一定频率的光子;粒子的行为则需由波函数描述,具有波动性。

见“哈密顿函数的平面波表示”。

一、基本概念和基本规律
Fundamental Conception and Fundamental Law

场点 field point 物理或数学场中的空间坐标点称为场点。电磁学中指电磁场的空间坐标点为场点。

源点 source point 电荷、电流是激发电磁场的源,在计算电荷、电流激发电磁场时,分布电荷、电流的空间点称为源点。

自由空间 free space 自由空间是指不存在电荷、电流的空间。在此空间中电磁场不被散射或吸收。

静磁场对电流系作用的力 force on current system by magneto-static field 体积 V 内以电流密度 $\boldsymbol{J}(x,y,z)$ 分布的电流系,在磁感应场 $\boldsymbol{B}$ 中受到的力为

$$\boldsymbol{F}=\int_V \boldsymbol{f}\,\mathrm{d}v=\int_V \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{B}\,\mathrm{d}v$$

或由磁场的应力张量表示

$$\boldsymbol{F}=\int_V \boldsymbol{f}\,\mathrm{d}v=\oiint_S \Phi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=$$

$$\oiint_S \frac{1}{\mu_0}\left[(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{n})\boldsymbol{B}-\frac{1}{2}B^2\boldsymbol{n}\right]\mathrm{d}s$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 为面元 $\mathrm{d}s$ 的法向单位矢量,力密度

$$\boldsymbol{f}=\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{B}=\nabla\cdot\Phi=\frac{1}{\mu_0}\begin{pmatrix}\frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} B_x^2-B^2/2 & B_xB_y & B_xB_z \\ B_yB_x & B_y^2-B^2/2 & B_yB_z \\ B_zB_x & B_zB_y & B_z^2-B^2/2 \end{pmatrix}$$

见“电磁场应力张量”。

宏观电磁场 macroscopic electromagnetic fields 即麦克斯韦电磁场,见“麦克斯韦电磁场”。

麦克斯韦电磁场 Maxwell electromagnetic field 即宏观电磁场。任何场点处的宏观电、磁场强度 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$,分别是该场点近邻微小但有限区域内相应的微观场 $\boldsymbol{e}$、$\boldsymbol{b}$ 在短暂时间内的时、空平均

$$\boldsymbol{E}(x,y,z,t)=\bar{\boldsymbol{e}}=\frac{1}{2TV}\int_{-T}^{T}\iiint_V \boldsymbol{e}(x+\zeta,y+\eta,z+\zeta;t+\tau)\,\mathrm{d}\zeta\,\mathrm{d}\eta\,\mathrm{d}\zeta\,\mathrm{d}\tau$$

$$\boldsymbol{B}(x,y,z,t)=\bar{\boldsymbol{b}}=\frac{1}{2TV}\int_{-T}^{T}\iiint_{V}\boldsymbol{b}(x+\zeta,y+\eta,z+\zeta;t+\tau)\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta\mathrm{d}\zeta\,\mathrm{d}\tau$$

这里 V 是宏观尺度甚小但有限的空间区域；T 为短暂的时间间隔。

宏观电磁场满足麦克斯韦方程组

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\rho_f,$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0,$$

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial\boldsymbol{t}},$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{J}_f+\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial\boldsymbol{t}}$$

见“洛伦兹场”,“洛伦兹电动力学”,“静止媒质中麦克斯韦的方程组”,“麦克斯韦电动力学”。

麦克斯韦电动力学 Maxwell electrodynamics 即宏观电动力学,是研究宏观电磁场属性及其与带电粒子相互作用的学科。任何一点处的电磁场强度或是电荷、电流等物理量都是相应的微观物理量在该点近邻宏观上微小区域和短暂时间内的平均。麦克斯韦方程组是麦克斯韦(宏观)电动力学遵循的基本规律。

见“电动力学”,“麦克斯韦电磁场”,“麦克斯韦方程组”,“洛伦兹电动力学”,“洛伦兹场”。

微观电磁场 microscopic electromagnetic fields 从原子、分子尺度的微观观点考察电磁场,总是处在真空环境;作为场源,所有分布的电荷及电流都是自由电荷和自由电流。这种真空环境中的微观电荷、电流确定的电磁场称为微观电磁场。不过,依然把微观电磁场作为连续统看待,不考虑它的粒子性,故仍然是经典的场而非量子场。

有时称微观电磁场为洛伦兹场。

见“洛伦兹电动力学”,“麦克斯韦电动力学”,“麦克斯韦电磁场”

洛伦兹场 Lorentz fields 即微观电磁场,见“微观电磁场”。

洛伦兹电动力学 Lorentz electrodynamics 洛伦兹电动力学讨论的是真空背景下电磁场及其与荷电粒子相互作用的规律,认为所有宏观电磁学规律在洛伦兹电动力学中同样适用,只是所有的电荷都是由荷电粒子构成的,电流则由运动电荷形成:$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{t})=\rho(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r},t)$。

洛伦兹电动力学的基本方程为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$$

$$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\rho\boldsymbol{u}+\varepsilon_0\mu_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t}$$

场对电荷电流的作用力

$$\boldsymbol{f}=\rho(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B})$$

以及电荷、电流连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u})=0。$$

在经典电动力学范畴中,洛伦兹电动力学用于讨论原子、分子尺度下的微观电磁现象。

见“麦克斯韦电磁场”。

位移电流 displacement current 媒质中电位移矢量 $\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r},t)$的时间变化率$\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial\boldsymbol{t}}$称为位移电流(密度)。这里 $\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}$ 是媒质中的电位移矢量。媒质中的位移电流,包含真空位移电流 $\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial\boldsymbol{t}}$和极化电流$\frac{\partial\boldsymbol{P}}{\partial\boldsymbol{t}}$两部分。

媒质中的磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 和自由电流密度 $\boldsymbol{J}_f$ 在稳恒情形下满足安培(Ampere)环路定理:$\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{J}_f$ 这与稳恒时的电流连续方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{J}_f=0$ 并无矛盾。但在不稳定情形下却不符合电荷守恒定律:$\nabla\cdot\boldsymbol{J}_f+\frac{\partial\rho_f}{\partial t}=0$。引入位移电流 $\boldsymbol{J}'=\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}$,将环路定理推广为$\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{J}_f+\boldsymbol{J}'=\boldsymbol{J}_f+\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}$,则不仅适用于稳恒情形,而且在不稳定情形下也能符合电荷守恒定律;这一推广的公式,成为描述电磁场运动的基本方程之一,它揭示了电场的变化也能激发磁场。位移电流的引入是麦克斯韦(J.C.Maxwell)的巨大贡献。

见“电位移矢量”。

麦克斯韦方程组 Maxwell equations 麦克斯韦方程组描述宏观电、磁现象遵循的基本规律;包含四个电磁场应满足的微分方程。

见“真空中的麦克斯韦方程组”，“静止媒质中的麦克斯韦方程组”，“运动媒质中的麦克斯韦方程组”，“麦克斯韦方程组的协变形式”，“介质中麦克斯韦方程组的协变形式”等条目。

真空中的麦克斯韦方程组 Maxwell equations in vacuum 麦克斯韦方程组是描写电磁场运动和与电荷、电流依存的基本规律；包含四个矢量微分方程。不存在媒质时（真空情形），它们的微分形式和相应的积分形式如下

(1) $$\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\frac{\rho}{\varepsilon_0},$$

$$\oiint_S \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}s=\frac{1}{\varepsilon_0}\iiint_V \rho\mathrm{d}v$$

(2) $$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0,$$

$$\oiint_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=0$$

(3) $$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial\boldsymbol{t}},$$

$$\oint_L \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}l=-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{t}}\iint_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

(4) $$\nabla\times\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{J}+\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial\boldsymbol{t}},$$

$$\oint_L \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}=\mu_0\iint_S \boldsymbol{J}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}+\mu_0\varepsilon_0\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{t}}\iint_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

式中，$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 分别是电磁场的电场强度和磁感应强度；ρ、$\boldsymbol{J}$ 分别为电荷密度和电流密度。常数 $\varepsilon_0=10^7/4\pi c^2=8.854187818\times10^{-12}F/m$，常被称为真空介电常数；常数 $\mu_0=4\pi\times10^7\mathrm{H/m}$，常被称为真空磁导率。

真空中麦克斯韦方程组还可以写成相对论协变表式，见“麦克斯韦方程组的协变表述”。

见“微观电动力学”。

静止媒质中的麦克斯韦方程组 Maxwell equations for stationary media 静止媒质中的麦克斯韦方程组，是静止媒质中电磁场行为的基本规律的数学表示式；包含四个矢量微分方程，在介质中它们是

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\rho_f,$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0,$$

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial\boldsymbol{t}},$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{J}_f+\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}。$$

式中 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别是电场强度、磁感应强度、电位移矢量和磁场强度；ρ_f 和 $\boldsymbol{J}_f$ 分别是自由电荷密度和自由电流密度。对于电导率为 σ 的各向异性导电媒质 $\boldsymbol{J}_f=\sigma\boldsymbol{E}$。

见“宏观电磁场”。

运动媒质中的法拉第定理 Faraday theorem for moving media 设媒质相对于实验室参照系以比光速 c 甚小的速度 $\boldsymbol{u}$ 运动，则此运动媒质中的法拉第定理可表示为

$$\nabla\times(\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B})=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$$

式中 $\boldsymbol{E}'$ 为与运动媒质相对静止的观察者测量到的电场强度；$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}'-\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别是在实验室参照系中的电场强度和磁感应强度。

运动媒质中的麦克斯韦方程组 Maxwell equations for moving media 设媒质以速度 $\boldsymbol{u}$ 运动，$|\boldsymbol{u}|\ll c$，则运动媒质中的 Maxwell 方程组为

$$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=\rho_{\mathrm{f}},$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0,$$

$$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t},$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}=\mu_0\left(\boldsymbol{J}_{\mathrm{f}}+\rho_{\mathrm{f}}\boldsymbol{u}+\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}+\nabla\times(\boldsymbol{P}\times\boldsymbol{u})\right)。$$

式中 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别是电场强度、磁感应强度、电位移矢量和磁场强度；ρ_{f} 和 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{f}}$ 分别是自由电荷密度和自由电流密度；$\boldsymbol{P}$ 为媒质的电极化矢量，μ_0 是真空磁导率。对于 $u\sim c$ 情形则由麦克斯韦方程组的相对论协变表示通过洛伦兹变换得到运动媒质中的麦氏方程组

见“宏观电磁场”，“介质中麦克斯韦方程组的协变表述”、相对论部分“洛伦兹变换”。

法拉第圆盘 Farady disk 一金属圆盘置于与盘面垂直的磁场中，当圆盘绕通过圆心并与盘面垂直的轴转动时，圆盘边缘与盘心间存在电势差。这样的圆盘装置，称为法拉第圆盘。存在电势差是因为在磁场中的运动导体内，将出现动态的感应电场 $\boldsymbol{E}'=\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$。这里 $\boldsymbol{v}$ 是导体的运动速度。

电动力学的相似原理 similitude principle in electrodynamics 电动力学相似原理，是指两个不同的电磁边值问题之间可能建立相似关系。这在电磁器件的设计中，很有用处。

引进无量纲的电磁场强度 E' 和 H'；$E=eE'$，$H=hH'$．并设长度 $l=\lambda L$，时间 $t=\tau T$．这里 e，h，λ 和 τ 分别是各对应量的单位；L、T 分别是长度和时间的数值。这样，根据麦克斯韦方程组，可得出下列两个无量纲方程

$$\nabla\times\boldsymbol{E}'+\alpha\frac{\partial\boldsymbol{H}'}{\partial T}=0$$

$$\nabla\times\boldsymbol{H}'-\beta\frac{\partial\boldsymbol{E}'}{\partial T}-\gamma\boldsymbol{E}'=0$$

式中，$\alpha=\frac{\mu\lambda}{\tau}\ \frac{h}{e}$，$\beta=\frac{\varepsilon\lambda}{\tau}\ \frac{e}{h}$，$\gamma=\sigma\lambda\ \frac{e}{h}$。由此可见，两个电磁边值问题相似的充要条件是，上列方程中的系数 α、β 和 γ 在这两问题中分别相同。或者，在这三个系数中消去 h，l，e 得 $\alpha\beta=\varepsilon\mu\left(\frac{\lambda}{\tau}\right)^2=C_1$，$\alpha\gamma=\mu\sigma\frac{\lambda^2}{\tau}=C_2$；两个电磁边值问题相似的条件，是必须具有相同的 C_1 和 C_2。例如长度尺寸 λ 缩小一半，磁导率 μ 就需要增至四倍，才能同时保持 C_1、C_2 不变。

见“麦克斯韦方程组”。

电位移矢量 electric displacement vector 定义电位移矢量 $\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}$，是为在介质中便于求解电磁场而引入的辅助量。这里 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 分别是介质中的电场强度和电极化矢量；ε_0 为真空介电常数。

束缚电荷密度 bound charge density 单位体积内的束缚电荷称束缚电荷密度，束缚电荷是指介质中束缚在原子或分子处，不能在介质中自由运动的电荷，通常物质是中性的，宏观平均的束缚电荷密度为 0．但当介质在外场中发生电极化时，则有可能形成不为 0 的宏观束缚电荷密度 ρ_p；束缚电荷密度与电极化矢量 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)$ 的散度间存在关系 $\rho_p=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)$。

本构方程 constitutive equation 媒质内部存在电磁场时，将在媒质内引起诱导电荷和诱导电流，这些诱导量或与之相关的物理量分别跟电场强度 $\boldsymbol{E}$，磁场强度 $\boldsymbol{B}$ 之间的关系方程，称为本构方程。例如 $\boldsymbol{P}=\varepsilon_0\chi\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{J}=\sigma\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{M}=\lambda\boldsymbol{B}$，$\boldsymbol{H}=\frac{\boldsymbol{B}}{\mu}$ 等都是本构方程。在这些方程中都存在与媒质本身结构有关的常数 ε、μ、χ、λ、σ 等，“本构”之义由此而得。

极化电流 polarization currents 介质的电极化随时间变化而形成的诱导电流，称极化电流；极化电流密度为 $\boldsymbol{J}_\mathrm{P}=\frac{\partial\boldsymbol{P}}{\partial t}$。这里 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t)$ 为介质内的电极化矢量。

均匀媒质中的弛豫时间 relaxation time in homogeneous medium 均匀媒质中任意一点的电荷密度降至其初始值 $1/e$ 的时间，称为弛豫时间。对介电常数和电导率分别为 ε 和 σ 的媒质不计磁效应时，可由电荷、电流连续性方程证得媒质内的电荷、电流弛豫时间为 $\tau=\frac{\varepsilon}{\sigma}$。媒质的导电性越好（$\sigma$ 越大），弛豫时间越短。通常 τ 都很小，即使像蒸馏水这样很不导电的媒质，弛豫时间也不超过 10^{-6} s。

分子场 molecular fields 介质中作用于单个介质分子的总电场，称为分子场。分子场 $\boldsymbol{E}_m$ 包括介质中的宏观平均电场 $\boldsymbol{E}$ 和其他分子的极化电荷在该分子处的电场之和：$\boldsymbol{E}_m=\boldsymbol{E}+v\frac{\boldsymbol{P}}{\varepsilon_0}$．这里 $\boldsymbol{P}$ 是介质的电极化矢量；v 是与介质分子的排列有关的常数，对具有高度对称性的晶体（例如立方晶系的晶体）和各向同性的介质或无规排列的非晶体 $v=1/3$．

分子场又称洛伦兹有效场。

洛伦兹有效场 Lorentz effective fields 洛伦兹有效场，即分子场。见“分子场”。

克劳修斯-莫索提公式 Clausius-Mossotti relation 介质的介电常数 ε 与介质分子常数之间的关系式：

$$\frac{\varepsilon-\varepsilon_0}{\varepsilon+2\varepsilon_0}=\frac{N_\mathrm{A}\rho_\mathrm{m}\alpha}{3M}$$

称为克劳修斯-莫索提公式。式中 N_A 为阿伏加德罗（Avogadro）常数；ρ_m 和 M 分别是介质的密度和分子量；α 是介质的极化率，是分子电偶矩 $\boldsymbol{p}$ 与有效电场 $\boldsymbol{E}_\mathrm{ef}$ 的比例常数，定义为 $\boldsymbol{p}=\varepsilon_0\alpha\boldsymbol{E}_\mathrm{ef}$。

稀薄气体的介电常数 $\varepsilon\approx\varepsilon_0$，这时克劳修斯-莫索提公式简化为

$$\varepsilon-\varepsilon_0=\frac{\varepsilon_0 N_\mathrm{A}\rho_m\alpha}{M}。$$

洛伦兹-洛伦茨方程 Lorentz-Lorenz equation 在光频条件下，介质的折射率 n 与介质

密度 ρ 之间的关系,可直接由克劳修斯-莫索提(Clausius-Mossotti)公式得出,只需将相对介电常数 $\varepsilon_r=\varepsilon/\varepsilon_0$ 代以 n^2:

$$\frac{n^2-1}{n^2+2}=\frac{N_A\rho_m\alpha}{3M}$$

这个关系有时称为洛伦兹-洛伦茨方程。见“克劳修斯-莫索提公式”。

磁化电流密度 magnetization current density 引起介质磁化的宏观分子电流,称为磁化电流。它是由原子、分子中束缚电子的轨道运动及自旋,形成电流的宏观平均。介质的磁化电流密度 $\boldsymbol{J}_m$ 与介质的磁化强度 $\boldsymbol{M}$(单位体积内原子、分子磁矩的宏观平均)之间的关系为 $\boldsymbol{J}_m=\nabla\times\boldsymbol{M}$。

静电场边界条件 boundary condition of electrostatic 在两种不同介质的分界面处,或金属(良导体)表面处,稳恒电场(静电场)满足的衔接条件,称为静电场的边界条件。

设在介质 1 和介质 2 中的电场强度,电位移矢量,电势和介电常数(假定是线性、各向同性的)分别为 $\boldsymbol{E}_1$、$\boldsymbol{E}_2$,$\boldsymbol{D}_1$、$\boldsymbol{D}_2$,ϕ_1、ϕ_2,和 ε_1、ε_2,则在二介质分界面处各场量的静电边界条件如下:

(1) 对电场强度 $\boldsymbol{E}$

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)=\sigma_{总},$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)=0;$$

(2) 对电位移矢量 $\boldsymbol{D}$

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1)=\sigma_f,$$

$$\boldsymbol{n}\times(\varepsilon_1\boldsymbol{D}_2-\varepsilon_2\boldsymbol{D}_1)=0;$$

(3) 对电势 ϕ(设界面处不存在偶电层)

$$\phi_2-\phi_1=0,\frac{\partial\phi_2}{\partial n}-\frac{\partial\phi_1}{\partial n}=\sigma_{总}$$

或

$$\varepsilon_2\frac{\partial\phi_2}{\partial n}-\varepsilon_1\frac{\partial\phi_1}{\partial n}=\sigma_f.$$

导体外介质中的场,在导体表面处满足的边界条件:

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{E}=\sigma_{总},\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{E}=0;$$

$$\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{D}=\sigma_f,\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{D}=0;$$

$$\phi=\phi_c(\text{常数}),-\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{n}}=\sigma_f.$$

上列各式中 $\boldsymbol{n}$ 为分界面法线的单位矢量,$\sigma_{总}$ 和 σ_f 分别是分界面处的总面电荷密度和自由电荷面密度,ε 为金属外介质的介电常数(假定是线性,各向同性的)。

静磁场边界条件 boundarym condition of magnetostatic 在两种不同媒质的分界面处稳恒磁场(静磁场)满足的衔接条件,称为静磁边界条件。

设在介质 1 和介质 2 中的磁感应强度,磁场强度,磁标量势,矢量势和导磁系数(假定是线性、各向同性的)分别为 $\boldsymbol{B}_1$、$\boldsymbol{B}_2$,$\boldsymbol{H}_1$、$\boldsymbol{H}_2$,ϕ_1、ϕ_2,$\boldsymbol{A}_1$、$\boldsymbol{A}_2$ 和 μ_1、μ_2,则在二介质分界面处各场量的静磁边界条件如下:

(1) 对磁感应强度 $\boldsymbol{B}$

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)=0,$$

$$\boldsymbol{n}\times\left(\frac{\boldsymbol{B}_2}{\mu_2}-\frac{\boldsymbol{B}_1}{\mu_1}\right)=\boldsymbol{K}_f;$$

(2) 对磁场强度 $\boldsymbol{H}$

$$\boldsymbol{n}\cdot(\mu_2\boldsymbol{H}_2-\mu_1\boldsymbol{H}_1)=0,$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)=\boldsymbol{K}_f;$$

(3) 对矢量势 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{A}_2-\boldsymbol{A}_1)=0,$$

$$\boldsymbol{n}\times\left(\frac{A_2}{\mu_2}-\frac{A_1}{\mu_1}\right)=\boldsymbol{K}_f;$$

(4) 对磁标量势 ϕ

$$\phi_2-\phi_1=0,$$

$$\mu_2\left(\frac{\partial\phi_2}{\partial n}\right)-\mu_1\left(\frac{\partial\phi_2}{\partial n}\right)=0。$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 是分界面法线的单位矢量,$\boldsymbol{K}_f$ 是分界面处的表面自由电流密度。

电磁场边界条件 boundary condition of electromagnetic field 在真空和媒质或二种不同媒质的分界面处电磁场满足的衔接条件,即是电磁场边界条件。

设在二介质的分界面处介质 1 和介质 2 中的电场强度,电位移矢量,磁感应强度和磁场强度分别为 $\boldsymbol{E}_1$、$\boldsymbol{E}_2$,$\boldsymbol{D}_1$、$\boldsymbol{D}_2$;$\boldsymbol{B}_1$、$\boldsymbol{B}_2$ 和 $\boldsymbol{H}_1$、$\boldsymbol{H}_2$,则在分界面处的电磁场边界条件包含如下关系

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{D}_1-\boldsymbol{D}_2)=\sigma_f;$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2)=0$$

$$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{B}_1-\boldsymbol{B}_2)=0;$$

$$\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{H}_1-\boldsymbol{H}_2)=\boldsymbol{K}_f$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 是分界面法线的单位矢量；σ_f 是分界面处的自由面电荷密度；$\boldsymbol{K}_f$ 为分界面处的自由表面电流密度。这些条件不仅适用于静电和静磁情形，同样也适用于不稳定电磁场的情形。

见“静电场边界条件”，“静磁场边界条件”。

能量平衡方程 energy balance equation 根据麦克斯韦方程组，并设介质的介电常数和磁导率都是常数，可得出方程

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})\mathrm{d}v$$
$$=\int_V\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{J}\mathrm{d}v+\oint_S(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

这便是电磁能量平衡方程。上式左方为单位时间内，体积 V 中电磁场能量的减少。右方第一项可写为 $\int_V\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{J}\mathrm{d}v=\int_V\left[\frac{J^2}{\sigma}-\boldsymbol{E}'\cdot\boldsymbol{J}\right]\mathrm{d}v$ 是媒质中的焦耳损耗功率和单位时间内外电动势作的功；第二项则是单位时间内流过边界面的电磁场能量。能量平衡方程微分形式为

$$\frac{\partial\boldsymbol{u}}{\partial\boldsymbol{t}}+\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{J}+\nabla\cdot\boldsymbol{S}=0$$

式中，$\boldsymbol{u}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{H})$ 为介质中的电磁场能量密度；$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$ 是坡印亭矢量。电磁场的能量平衡方程常被称为坡印亭定理。

见“电磁场能量密度”。

坡印亭定理 Poynting theorem 见“能量平衡方程”。

电磁场能量 energy of electro-magnetic field 电磁场是客观存在的一种物质形态，和其他物质一样，电磁场也具有能量属性。电磁场能量即指电磁场具有的能量。电磁场是有电荷、电流激发的；在电荷、电流体系“建立”的过程中需要克服电磁场的力作功，转换成体系的能量。从麦克斯韦电磁场的观点来看，这部分能量是储藏在电磁场中的，成为电磁场能量。

见“电磁场能量密度”。

电磁场能量密度 energy density 电磁场在单位体积内包含的能量，称为电磁场的能量密度。真空中电磁场的能量密度是

$$\boldsymbol{u}=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0E^2+\frac{B^2}{\mu_0}\right)\qquad(1)$$

其中 $\frac{\varepsilon_0E^2}{2}$ 是电场的能量密度；$\frac{B^2}{\mu_0}$ 则是磁场的能量密度。

介质中电场能量和磁场能量的虚变更分别是 $\delta U_e=\int\boldsymbol{E}\cdot\delta\boldsymbol{D}\mathrm{d}v$，和 $\delta U_m=\int\boldsymbol{H}\cdot\delta\boldsymbol{B}\mathrm{d}v$（这里的积分是对整个存在场的空间进行的）。在场强不是很强的情形下，除铁电介质外，可认为 $\boldsymbol{D}$ 跟 $\boldsymbol{E}$ 成线性关系。同样，除铁磁介质外 $\boldsymbol{H}$ 跟 $\boldsymbol{B}$ 成线性关系，从而电场和磁场的能量可分别写为

$$U_e=\frac{1}{2}\int\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}\mathrm{d}v,$$
$$U_m=\frac{1}{2}\int\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B}\mathrm{d}v\qquad(2)$$

由此，介质中电磁场的能量密度是 $\boldsymbol{u}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})$。不过，这里建立场的虚过程是等温过程，从热力学观点看，U_e 和 U_m 应分别是介质中电场和磁场的自由能，虽然这里仍使用电磁学中习惯的术语“电场能”和“磁场能”。

能量流密度矢量 energy flow density vector 单位时间内通过单位面积的电磁场能量流，即坡印亭矢量。见“坡印亭矢量”。

坡印亭矢量 Poynting vector 坡印亭矢量即是电磁场的能量流密度矢量 $\boldsymbol{S}$。在真空中定义为 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$；在介质中，则是 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$。单位时间内通过面积 S 的电磁能量为 $\boldsymbol{w}=\int_S\boldsymbol{S}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$。

动量平衡方程 momentum balance equation 设区域 V 内分布有以速度场 $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ 运动的电荷系；电荷密度为 $\rho(\boldsymbol{r})$。则由洛伦兹力公式及麦克斯韦方程组可导得：

$$\int_V\boldsymbol{f}\mathrm{d}v=-\varepsilon\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\mathrm{d}v+\oint_S\Phi\mathrm{d}\boldsymbol{s}$$

式中右方是场对电荷作用的力 $\int_V\boldsymbol{f}\mathrm{d}v=\int_V\rho(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B})\mathrm{d}v$，按力学原理可表示为电荷系机械动量的时间变化率 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{P}}{\mathrm{d}t}$；右方第一项可写为 $-\varepsilon\mu\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{t}}\int_V(\boldsymbol{E}\times H)\mathrm{d}v=-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{G}}{\mathrm{d}t}$，而第二项是区域 V 外的电磁场对 V 内电磁场作用的力；被

积函数 Φ 即是电磁场的应力张量。上面的表示式可重写为

$$\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{P}+\boldsymbol{G})}{\mathrm{d}t}+\oint_S(-\Phi)\mathrm{d}\boldsymbol{s}=0$$

考察此式的物理意义:若将 $\boldsymbol{G}=\varepsilon\mu\int_V \boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}\mathrm{d}v$,看成区域 V 内电磁场的动量;$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{D}\times\boldsymbol{B}$ 为动量密度,则第一项即是 V 内电磁场和电荷总动量的时间变化率;第二项可作为单位时间内流出界面的电磁场动量。故式(1)代表电荷系和电磁场动量的平衡关系,称为动量平衡方程。

见“电磁动量密度”,“电磁动量流密度”。

电磁场动量密度 momentum dens-ity of electromagnetic field 单位体积内的电磁场动量称为电磁动量密度。介质中的电磁场动量密度与电磁场之间的关系为 $\boldsymbol{g}=\varepsilon\mu\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$;真空中则是 $\boldsymbol{g}=\frac{1}{c^2\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$;电磁场动量与坡印亭矢量(Poyting's vector)$\boldsymbol{S}$ 之间存在关系 $\boldsymbol{g}=\varepsilon\mu\boldsymbol{S}$,这里 ε,μ 分别是介质的介电常数和磁导率。

见“动量平衡方程”。

电磁场动量流密度 electroma-gnetic momentum flow density 由麦克斯韦方程组和洛伦兹力公式可导出电磁场动量平衡方程:

$$\frac{\mathrm{d}(\boldsymbol{P}+\boldsymbol{G})}{\mathrm{d}t}+\oint_S(-\Phi)\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}=0$$

左方第一项中的 $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{G}$ 可分别解释为界面 S 包围区域内的电磁场动量和电荷动量,第二项则是单位时间内自界面 S 流出的电磁场动量;$-\Phi$ 称为电磁场动量流密度,其数值是单位时间内垂直流过单位面积的电磁场动量,电磁场的动量流密度是二级张量,恰好与电磁场应力张量 Φ 相负。

见“电磁动量平衡方程”,“电磁场应力张量”。

电磁场的惯量 inertia of electromagnetic fields 类似于机械物质,必须有外力作用才能使电磁场的动量改变;电磁场的这一特性,称为电磁场的惯量。

取体积 V 边界 S 的区域,由电磁场的动量平衡方程,可得方程 $\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{G}}{\mathrm{d}t}=\oint_S\Phi\mathrm{d}s-\boldsymbol{f}=\boldsymbol{F}$。式中 $\boldsymbol{G}=\int_V\varepsilon\mu(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H})\mathrm{d}v$ 是体积 V 内电磁场的动量;Φ 是电磁场的应力张量,则 $\oint_S\Phi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 为区域 V 外电磁场在边界 S 处对 V 内电磁场作用的应力;$-\boldsymbol{f}$ 是 V 内的电荷,电流对电磁场的作用力(洛伦兹力的反作用)。此方程的意义是区域 V 内电磁场动量的变化正比于区域内的电荷、电流以及区域外的电磁场对 V 内电磁场的作用力之和 $\boldsymbol{F}$。由此显示了电磁场的惯性。

见“动量平衡方程”。

电磁场应力张量 electromagnetic stress tensor 从麦克斯韦电磁场的观点,在电磁场内部也存在着应力;一体积内部的电磁场受到体积外部电磁场的力,是通过边界上的应力作用的。边界面上的应力可以由应力张量求出。介质中的电磁场应力张量与电磁场的关系,可表示为如下的矩阵形式:

$$\Phi=\begin{pmatrix} E_xD_x+H_xB_x-\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B}) & E_xD_y+H_xB_y & E_xD_z+H_xB_z \\ E_yD_x+H_yB_x & E_yD_y+H_yB_y-\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B}) & E_yD_z+H_yB_z \\ E_zD_x+H_zB_x & E_zD_y+H_zB_y & E_zD_z+H_zB_z-\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B}) \end{pmatrix}$$

它的元素

$$\Phi_{ij}=E_iD_j+H_iB_j-\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})\delta_{ij}\qquad(i,j=x,y,z)$$

构成一个二级张量;坐标变换时,每一元素按二级张量的变换规则变换。

电磁场能量-动量张量 energy-momentum tensor of electro-magnetic field 电磁场的应力

张量 Φ_{ij}，动量密度 $\boldsymbol{g}$ 和能量密度 $\boldsymbol{u}$ 可以构成关于洛伦兹变换协变的四维二级张量：

$$\boldsymbol{T}_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}\Phi_{11} & \Phi_{12} & \Phi_{13} & -icg_x \\ \Phi_{21} & \Phi_{22} & \Phi_{23} & -icg_y \\ \Phi_{31} & \Phi_{32} & \Phi_{33} & -icg_z \\ -icg_x & -icg_y & -icg_z & \boldsymbol{u}\end{pmatrix}$$

称为电磁场的能量-动量张量。由此可以将电磁场的动量平衡方程和能量平衡方程统一表示为洛伦兹变换的协变式：$\frac{\partial T_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}=-\boldsymbol{f}_\mu$。这里 $\boldsymbol{x}_\mu$ 和 $\boldsymbol{f}_\mu$ 分别是协变四维坐标矢量和四维洛伦兹力密度矢量；对同一项内的重复足码按爱因斯坦规则求和。

见“电磁场应力张量”，“能量、动量平衡方程的协变表式”，“坐标四维矢量”，“洛伦兹力密度四维矢量”。

二、稳恒电磁场
Stead Electromagnetic Field

标量场 scalar field　若某一物理量，在空间任何一点只需用一个与空间坐标和时间相关的参量描写，则此物理场是标量场。例如静电场的电势就是一个三维空间的标量场，静电场强度可用一标量函数 $\phi(\boldsymbol{r})$ 的负梯度表示：$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi(\boldsymbol{r})$，称为静电标量势场；对不稳定电磁场，可由标量场 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 和矢量场 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 表示：$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$，$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$，其中 $-\nabla\phi(\boldsymbol{r},t)$ 描述电场的无旋部分。温度场，密度场，以至量子力学中的粒子波函数等，也都是标量场。标量场中任一点处的数值在坐标变换中保持不变。

标量势 scalar potential　一个物理的矢量场可以用一个空间标量函数的梯度表示，则该空间函数代表的标量场就可称为该物理场的标量势。在电磁学中，常常特指与电场无旋部分相应的标量场函数为标量势；静电场是无旋场，静电势即是标量势。见“标量场”。

矢量场 vector field　若某一物理量在全部空间或一部分空间，需用具有矢量变换特性的函数来确定，则该物理量代表的是矢量场；矢量场可用一矢量函数描写。矢量场在变化过程中，场中每一点的场量都可能独立变化，故矢量场和标量场一样是无限自由度的连续统。电场强度 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)$ 都是三维空间的矢量场，分别用来描述电场和磁场；三维电磁场的矢量势场 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ 和标量势场 $\phi(\boldsymbol{r},t)$，则可构成四维空间关于洛伦兹变换协变的四矢量势场：$\boldsymbol{A}_\mu=\left(\boldsymbol{A},\frac{i}{c}\phi\right)$。

见“四维矢量势”。

表面电荷 surface charge　分布在媒体表面上的电荷称为表面电荷。

“表面电荷”是一个理想化的概念；实际上真实的电荷是分布在一定大小的空间区域内的，但如果电荷分布在媒质表面附近的薄层内，而薄层的厚度与所处理问题的空间尺度相比可以略去不计，或者可以不计薄层厚度内电荷的具体分布状况，则这样的薄层电荷可看成媒体的表面电荷。

恩莎定理 Earnshaw theorem　恩莎定理为：置于静电场中的电荷，在没有其他外力作用时，不可能处于平衡状态。

格林倒易定理 Green reciprocation theorem　设空间由若干曲面 S 划分为若干区域 V。若 $\phi(\boldsymbol{r})$ 是电荷系以体电荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 分布和以面电荷密度 $\sigma(\boldsymbol{r})$ 分布激发的静电势，而 $\phi'(\boldsymbol{r})$ 是以体电荷密度 $\rho'(\boldsymbol{r})$ 分布和面电荷密度 $\sigma'(\boldsymbol{r})$ 分布激发的静电势，则以下的关系成立：

$$\int_V\rho\phi'\mathrm{d}v+\int_S\sigma\phi'\mathrm{d}s=\int_V\rho'\phi\mathrm{d}v+\int_S\sigma'\phi\mathrm{d}s$$

称为格林倒易定理。

平均值定理 mean value theorem　在没有电荷存在的空间中，任何一点处的静电势等于以该点为中心的球面上电势的平均值。这一结论称为静电势的平均值定理。

汤姆孙定理 Thomson theorem　汤姆孙定理为：介质中导体表面上的电荷将这样地分布，以使其激发的静电场的能量为最小。

静电惟一性定理 electrostatic uniqueness theorem　若是在给定边界的区域内，求得静电问题电场强度 $\boldsymbol{E}$ 或静电势 ϕ 的解，该解在边界处满足给定的边界条件，则此解是该区域内

所求静电问题的惟一正确的解。此即静电惟一性定理。

矢量势的惟一性定理 uniqueness theorem for the vector potential 在静磁问题中，若求得区域 V 内矢量势的解为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$，且在区域的边界处满足给定的边界条件，则这一矢量势的解，是惟一正确的解。这一定理称为矢量势的惟一性定理。

见“电磁场解的惟一性”。

电磁场解的惟一性 uniqueness of solution for electromagnetic fields 电磁场解的惟一性是指，在区域 V 内 $t>0$ 时刻的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁场强度 $\boldsymbol{H}$（磁感应强度 $\boldsymbol{B}$）由它们的初始值，以及 $t\geqslant 0$ 时它们在边界上的切线方向分量惟一地确定。

见“静电惟一性定理”，“矢量势的惟一性定理”

保角变换方法 conformal transformation method 保角变换是利用复变量解析函数实部和虚部都满足拉普拉斯（Laplace）方程的特点，及通过复平面变换以简化求解二维拉普拉斯方程边值问题的一种方法。由于在没有电荷分布的空间中静电势满足拉普拉斯方程，故此法可用来求解二维的静电势问题。

通过一适当的解析复变函数 $f(z)$，将复变数平面 $z=x+\mathrm{i}y$ 变换成另一复变数平面 $z'=f(z)=x'+\mathrm{i}y'$ 或 $z=g(z')$ 将 z 平面上位形复杂的边值问题，变换至 z' 平面上位形简单的相应边值问题，以便容易求出静电势的解 $\phi'(x',y')$。由此在 z' 平面中构成解析的复变函数 $W'(z')=\phi'+\mathrm{i}\Psi'$。最后再由 z' 平面换回 z 平面 $W(z)=W'(f(z))=\phi(x,y)+\mathrm{i}\Psi(x,y)$，从而得到欲求的二维拉普拉斯方程边值问题的解。

由于通过解析函数变换时，分别在二复平面中任意二曲线元之间的夹角不变，故此种变换称为保角变换。

分离变量法 method of seperation variables 在求解拉普拉斯方程 $\nabla^2\Psi=0$，或亥姆霍兹（Helmholtz）方程 $\nabla^2\Psi+k\Psi=0$ 等偏微分方程的边值问题时，将解函数 $\Psi(x,y,z)$ 设定为每一维的单一坐标变量函数的乘积。例如在直角坐标下，$\Psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$。由于这些偏微分方程都是线性方程，以这样分离变量的函数形式代入，即可使之化为关于各单一坐标变量函数的常微分方程，易于求解。采用这种分离坐标变量求解偏微分方程的方法，称为分离变量法。

分离变量法是求解静电、静磁以及电磁场波动方程边值问题的主要解析方法之一。

电像法 electrical images method 电像法是在导体或介质分界面附近存在电荷时，用虚拟的镜像电荷代替边界上感应电荷的影响，以此作为求解静电边值问题的一种方法。

在接地导体附近的单位点电荷及其镜像点电荷的电势，即是相应边值问题的静电格林函数（Green function）（参见“静电格林函数”）。

反演方法 method of inversion 对于半径为 a 的球面，变换关系 $rr'=a^2$，将球外的点 $p(r,\theta,\varphi)$ 沿球半径映射至球内点 $P'(r',\theta,\varphi)$，反之亦然；称关于球面的反演变换。若分别在 P,P' 点放置点电荷 Q、Q' 且满足关系 $Q'=\frac{a}{r}Q\left(\text{或 } Q=\frac{a}{r'}Q'\right)$ 则这两电荷激发的静电势在球面上任意点处分别相等；称 Q、Q' 互为球面反演电像。这个特性可用来求解静电势的边值问题。仿此，也可利用来求解静磁的边值问题。

静电格林函数 electrostatic Green function 在给定区域 V 内，放置单位点电荷，要求此点电荷的电势在区域边界面处的静电势为 0，则此单位点电荷在区域内的静电势函数便是区域 V 的第一类静电格林函数；若边界面处静电势的法向导数为 0，则此单位点电荷在区域内的静电势函数便是给定区域的第二类静电格林函数。

第一类静电格林函数是下列泊松（Poisson）方程第一类边值问题的解：

$$\nabla^2 G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{\varepsilon_0}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mid_S=0;$$

第二类静电格林函数是下列方程第二类边值问题的解：

$$\nabla^2 G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{\varepsilon_0}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

$$\left.\frac{\partial G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}{\partial n}\right|_S = 0$$

式中 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 是 δ 函数；S 代表给定区域的边界面；$\frac{\partial G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}{\partial n}$ 为函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的边界面法向梯度。

格林函数求解法　method of solution by Green function　格林函数求解法是利用数学上的格林函数和格林定理，求解偏微分方程边值问题的方法。这个方法在求解物理问题中，具有重要的理论意义。

在电磁学中，用格林函数方法求解静电问题和时变电磁场波动方程。例如，静电势第一类边值问题（Dirichelet 边值问题）的解可表示为

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \int_V G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v' - \varepsilon_0\oint_S \phi(\boldsymbol{r}')\frac{\partial G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}{\partial n'}\cdot \mathrm{d}s';$$

静电势第二类边值（Neumann 边值问题）问题的解是

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \int_V G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v' + \varepsilon_0\oint_S G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\frac{\partial \phi(\boldsymbol{r}')}{\partial n'}\cdot \mathrm{d}s'。$$

这里 $\rho(x,y,z)$ 是电荷密度；$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 为相应边值问题的静电格林函数。

见“静电格林函数”。

矢量势　vector potential　由于磁场是无源场，$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$，故可表示为另一矢量场的旋度：
$\boldsymbol{B}(x,y,z;t) = \nabla\times\boldsymbol{A}(x,y,z;t)$
这个矢量场 $\boldsymbol{A}(x,y,z;t)$ 称为磁场的矢量势场，简称矢量势。

从经典电动力学观点，矢量势 $\boldsymbol{A}$ 只是为便于计算磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 而引入的辅助量。但量子力学研究表明，它对荷电粒子波的量子干涉效应产生影响，它是实在的物理场。见“阿哈荣诺夫-博姆效应”。

静磁标势　magnetostatic scalar potential　介质中不存在传导电流时，静磁或稳恒磁场的磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 是无旋场，即 $\nabla\times\boldsymbol{H}=0$。因而可以引入标量势 ϕ_m，磁场强度可表示为 $\boldsymbol{H}=-\nabla\phi_m$。这样引入的标量势 ϕ_m 即是静磁标势，或称磁标量势。由于至今尚未确切发现单独磁荷的存在，磁标量势 ϕ_m 和磁场强度矢量 $\boldsymbol{H}$ 一样，只是为了方便运算而引入的辅助量。

多极展开　multipole expansion　多极展开是指将一电荷系（电流系）的电（磁）学效果，分解为各级电（磁）极矩的电（磁）学效果之和。下面分述关于电荷系的“电多极展开”和电流系的“磁多极展开”二种情形。

（一）电多极展开

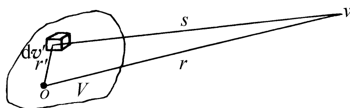
在一微小区域 V 内，按电荷密度 $\rho(\boldsymbol{r}')$ 分布的电荷系，在远处的电学效果（例如，它所激发的电场）等同于在 V 内一固定点处放置与电荷系同样电量的点电荷，同样电偶矩的电偶极子，同样电四极矩的四极子，等各级电多极子的电学效果之和。在数学上，则是在固定点附近对电荷分布的微小源点位置 $\boldsymbol{r}'$ 作泰勒（Tayler）展开。参见下图，并注意 $r'\ll r$，有

$$\frac{1}{s} = \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \frac{1}{\boldsymbol{r}} + \sum_{i=1}^{3} x'_i \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{s}\right)_{s=r} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} x'_i x'_j \frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j}\left(\frac{1}{s}\right)_{s=r} + \cdots$$

因而，电荷系在远处 $\boldsymbol{r}$ 的标量势 $\phi(\boldsymbol{r})$，可展开成如下的级数

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V \frac{\rho(\boldsymbol{r}')}{s}\mathrm{d}v' = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Q}{\boldsymbol{r}} + \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}}{\boldsymbol{r}^3} + \frac{1}{6}\sum_{i,j=1}^{3} D_{ij}\frac{\partial^2}{\partial x'_i \partial x'_j}\left(\frac{1}{s}\right)_{s=r} + \cdots\right]$$

上式方括号内各项除常数 $1/4\pi\varepsilon_0$ 外，分别是电荷系的总电荷 Q，电偶极矩 $\boldsymbol{p}$ 和电四极矩 $D_{ij}(i,j=1,2,3)$ 在 r 处的标量势贡献。



（二）磁多极展开

在一微小区域 V 内，按电流密度 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')$ 分布的电流系，在远处的磁学效果（例如，电流系激发的磁场的矢量势）等同于在 V 内一固定点处放置同样磁偶矩的磁偶极子，同样磁四极矩的

磁四极子以及等同的各级多极矩的磁多极子的磁学效果之和。与前类似，在固定点附近对电流分布的微小源点位置矢量 $\boldsymbol{r}'$ 作泰勒展开。微小区域内电流系的矢量势，可展开为

$$A=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')}{s}\mathrm{d}v'=\frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{1}{r}\int\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v'+\sum_{i=1}^{3}\frac{\partial}{\partial x'_i}\left(\frac{1}{s}\right)_{s=r}\int x'_i\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v'\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{\partial^2}{\partial x'_i\partial x'_j}\cdot\left(\frac{1}{s}\right)_{s=r}\int x'_ix'_j\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v'+\cdots\right]$$

方括号中第一项为0，因为电流总是闭合的；除常数因子 $\mu_0/4\pi$ 外，第二、第三项分别是磁极偶矩和磁四极矩对矢量势的贡献。对磁多极展开来说，磁偶极项是最主要的。

多极子 multipole 多极子是关于偶极子，四极子，…… 等 $2^n(n=1,2,\cdots\cdots)$ 高阶极子的通称。电偶极子，电四极子，电八极子，…… 等通称为电多极子；磁偶极子，磁四极子，…… 等通称为磁多极子。

见"电偶极子"，"电四极子"，"磁偶极子"，"多极展开"。

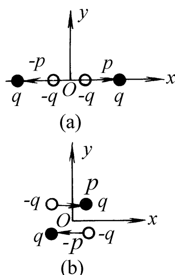
电四极矩 electric quadrupole moment 以电荷密度 $\rho(\boldsymbol{r})$ 分布在区域 V 内的电荷系其电四极矩定义为 $\boldsymbol{D}=\int_V(3\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}'-r'^2\boldsymbol{I})\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}V'$，各分量为 $D_{ij}=\int_V(3x'_ix'_j-r'^2\delta_{ij})\cdot\rho(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}V'(i,j=1,2,3)$ 构成二级张量。$\boldsymbol{I}$ 为单位二级张量。

见"多极展开"，"电四极子"

电四极子 electric quadrupole 二个相同的电偶极子相互非常靠近，方向相反时，便构成电四极子。这里"非常靠近"是指两偶极子间距离 $l\to 0$，但与电偶矩 p 的乘积 pl 则为一有限值。

图(a)和图(b)所示都是电四极子，它们分别具有四极矩分量 D_{11} 和 D_{12}。

见"四极矩"。



磁矩 magnetic moment 磁矩又称磁偶矩，是电流系中与电流密度的一次矩相关的物理量。

电子在原子或分子中作轨道运动时形成的磁矩称电子的轨道磁矩；荷电粒子的自旋则构成粒子的内禀(自旋)磁矩，称自旋磁矩。磁矩是物质磁性的基础。

在确定体积 V 内，按电流密度 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$ 分布的电流系统，其磁矩的定义是

$$\boldsymbol{m}=\frac{1}{2}\int_V\boldsymbol{r}'\times\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}v'$$

微小的闭合电流圈在远处的磁学效果等同于磁偶极子，它的磁矩为 $\boldsymbol{m}=I\boldsymbol{S}$。这里 I 是电流强度，$\boldsymbol{S}$ 为电流圈的面积矢量。若荷电粒子的自旋角动量为 $\boldsymbol{s}$，电荷为 e，质量为 m，则粒子的自旋磁矩是

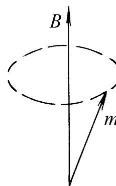
$$\boldsymbol{m}=\frac{e}{mc^2}\boldsymbol{s}。$$

磁偶极矩 magnetic moment 磁偶极矩，简称磁偶矩或磁矩。见"磁矩"。

磁偶极子 magnetic dipole 尺度充分小的闭合电流 i，在考虑远离它的电磁现象时，可近似地作为磁矩 $\boldsymbol{m}=i\boldsymbol{s}$ 的磁偶极子。式中 $\boldsymbol{s}$ 是电流圈包围的面积矢量。介质中原子或分子中电子的轨道运动及自旋，也构成具有一定磁矩的磁偶极子。参见"磁矩"。

拉莫进动 Larmor precession 由运动荷电粒子构成的体系，若其磁矩 $\boldsymbol{m}$ 偏离外磁场 $\boldsymbol{B}$ 方向，则磁矩将围绕磁场转动 —— 进动，如图所示。体系磁矩的这种进动称为拉莫进动。

见"拉莫进动频率"。



拉莫进动频率 Larmor precession frequency 在外磁场中，运动电荷体系的磁矩围绕磁场进动的频率，称为拉莫进动频率。电子轨道磁矩的拉莫进动圆频率为 $\omega=\frac{eB}{2m}$。式中 m 和 e 分别是电子的质量和电荷的绝对值；B 是外磁场磁感应强度的大小。

见“拉莫进动”。

g 因子 g-factor 见“朗德因子”。

朗德因子 Lande factor 对由复杂结构的荷电粒子构成的体系，它的磁矩跟其角动量之比可表示为 $\gamma=g\frac{e}{2m}$，这里 m 和 e 分别是电子的质量和电量的绝对值，常数因子 g 即是朗德因子，又称 g 因子。

见“旋磁比”。

旋磁比 gyromagnetic ratio 一运动电荷体系，它的磁矩 $\boldsymbol{m}$ 跟它的机械动量矩（角动量）$\boldsymbol{J}$ 的比 $\gamma=\frac{m}{J}$。称为该体系的旋磁比。这里假定体系的磁矩和角动量，具有共同的方向。对于电荷为 e 质量为 m 的荷电粒子体系，旋磁比是 $\gamma=\frac{e}{2m}$；由结构复杂的荷电粒子构成的体系，旋磁比可表示为 $\gamma=g\frac{e}{2m}$。这里 m 和 e 分别是电子的质量和电荷绝对值，g 称为朗德因子或 g 因子。

三、电 磁 波
Electromagnetic Wave

电磁波 electromagnetic wave 在自由空间中的电磁场藉电磁感应，以有限速度的波动形式传播，称为“电磁波”。电磁波是电磁场的运动形态，最先由麦克斯韦（James Clerk Maxwell）于 1865 年根据电磁理论指明电磁波的存在，赫兹（Heinrich Rudolf Hertz）则于 1888 年第一次从实验上获得验证。

在无自由电荷、电流分布的无限大均匀介质中，以一定角频率 ω 随时间变化的电场强度和磁感应强度 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 分别满足齐次波动方程：

$$\nabla^2\boldsymbol{E}-\varepsilon\mu\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2}=0;$$

$$\nabla^2\boldsymbol{B}-\varepsilon\mu\frac{\partial^2 B}{\partial t^2}=0$$

由此得出波动解。式中 ε、μ 分别是介质的介电常数和磁导率，通常它们都与 ω 相关。由此可知电磁波在该介质中传播的相速度大小为 $v=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$；在真空中，$v=c=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}=2.9979\times10^5$km/s，即真空中的光速。

见“单色平面电磁波”。

平面电磁波 plane electromagnetic wave 如果电磁波的等位相面是一平面，则称为平面电磁波。电磁波传播的方向与等相位面（波前）垂直。

见“电磁波”，“单色平面电磁波”。

单色平面电磁波 plane monochromatic electromagnetic wave 电磁场仅以单一频率随时间变化的平面电磁波，称为单色平面电磁波。数学上单色平面电磁波可表述为 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)$，也可用复数形式表示 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}$。波矢量 $\boldsymbol{k}$，波长 λ，角频率 ω 以及相位速度 $\boldsymbol{u}$ 之间存在关系：$k=\frac{2\pi}{\lambda}$，$\boldsymbol{u}=\frac{\omega}{k^2}\boldsymbol{k}$。

由麦克斯韦方程组可确定单色平面电磁波具有如下特性：

（1）横波，$\boldsymbol{E}$ 及 $\boldsymbol{B}$ 的方向都与电磁波的传播方向（波矢量 $\boldsymbol{k}$ 的方向）垂直；

（2）$\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 相互垂直，且与 $\boldsymbol{k}$ 的方向成右螺旋关系 $\boldsymbol{B}=\frac{1}{\omega}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{E}$；

（3）在绝缘介质中 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 的位相相同。采用国际单位制时 $\frac{\boldsymbol{E}_0}{\boldsymbol{B}_0}=\frac{\omega}{k}=\boldsymbol{u}=\frac{c}{n}=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$；高斯单位制下 $\frac{\boldsymbol{E}_0}{\boldsymbol{B}_0}=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_r\mu_r}}=\frac{1}{n}$。$c$ 是真空中的光速；n 为介质的折射率。

光学定理 optical theorem 媒质对于电磁波的散射截面 σ_s 和吸收截面 σ_{ab} 之和 σ_t 正比于电磁波前进方向的散射振幅的虚部。这个关系称为光学定理：

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\mathrm{Im}(\boldsymbol{F})_{\theta=0}$$

式中 k 是电磁波的波数，设入射波振幅为 E_0，$E_0\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)$ 是散射波的振幅矢量。

见“散射截面”,“吸收截面”。

表面电阻 surface resistance 高频交变电磁场(电磁波)将在导体表面附近的趋肤厚度薄层内形成感生电流,从而导致能量损耗,这一薄层内的能量损耗,可看成是以同样的有效值电流通过一等效电阻造成的;这个等效的电阻称为该导体的表面电阻。导体趋肤厚度内能量损耗功率的时间平均值。

$$\overline{S} = \overline{K^2}R;$$

导体的表面电阻:$R = \dfrac{1}{\sigma\delta}$

式中 K 是表面电流的峰值,σ 和 δ 分别是导体的电导率和趋肤深(厚)度。

复电导率 complex conductivity 导电媒质中,自由电荷在交变电场作用下运动,同时与媒质中的原子或分子碰撞。由于部分能量被转移,相当于电荷受到阻尼,由此,自由电子的运动方程可写为

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} + m\gamma\dot{\boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{E}_0 e^{-i\omega t}$$

其解是

$$\boldsymbol{r} = \frac{i}{m\omega(\gamma - i\omega)} e E_0 e^{-i\omega t}$$

媒质中的电流密度

$$\boldsymbol{J} = Ne\boldsymbol{v} = Ne\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{Ne^2}{m(\gamma - i\omega)}\boldsymbol{E} = \sigma'\boldsymbol{E}$$

这里电导率 $\sigma' = \dfrac{Ne^2}{m(\gamma - i\omega)}$ 是复数,称为复电导率。

复坡印亭矢量 complex Poynting vector 虽然实际的电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 都是实数矢量,但为运算方便也可分别用复数矢量表示。例如,对于以一定频率振动的定态电磁场,它的电、磁场强可分别表示为复数矢量 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{-i\omega t}$ 和 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_0 e^{-i\omega t}$。则能流密度的时间平均值,可通过复数表式来计算。

$$\overline{S} = \overline{\mathrm{Re}\,\boldsymbol{E} \times \mathrm{Re}\,\boldsymbol{H}} = \frac{1}{2}\mathrm{Re}(\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H})$$

由此可定义复数坡印亭矢量为 $\tilde{\boldsymbol{S}} = \dfrac{1}{2}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}^*$,它的实部 $\overline{\boldsymbol{S}} = \mathrm{Re}(\tilde{\boldsymbol{S}})$,即是电磁场能量流密度的时间平均值,这里 $\boldsymbol{H}^*$ 是磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 的复数共轭。此外,

$$\nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{S}} = -\frac{1}{2}\sigma\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{E}^* + i\frac{\omega}{2}(\mu\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{H}^* - \varepsilon\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{E}^*)$$

$$= -\overline{P} + i2\omega(\overline{u_m} - \overline{u_e})$$

即复数坡印亭矢量散度的实部,为单位体积媒质内的平均焦耳(Joule)损耗;虚部则是平均磁场能与平均电场能之差的 2ω 倍。

见“坡印亭矢量”。

导电媒质中的折射 refraction in conducting media 平面电磁波自介质 1 入射导电媒质 2 的表面(平面)。由于导电媒质中的传播常数 $\boldsymbol{k}_2 = \alpha + i\beta$ 是矢量,$k_2^2 = \omega^2\varepsilon_2\mu_2 + i\omega\sigma_2\mu_2$,这里 α 与 β 是实矢量,它们的方向不一致导致电磁波的等振幅面与等相位面不重合;等振幅面与表面平行,等相面与表面成一定的夹角(折射角 ψ,如图所示)。折射角与入射角 θ 之间的关系为

$$n(\theta) = \frac{\sin\theta}{\sin\psi} = \frac{1}{k_1}\sqrt{k_1^2\sin^2\theta + q^2}$$

式中 $\boldsymbol{k}_1 = \omega\sqrt{\varepsilon_1\mu_1}$ 是介质中电磁波的传播常数,$\boldsymbol{q}$ 是入射角 θ 的函数,由下式确定

$$\boldsymbol{q}^2(\theta) = \frac{1}{2}\left[\alpha^2 - \beta^2 + \boldsymbol{k}_1^2\sin^2\theta + \sqrt{4\alpha^2\beta^2 + (\alpha^2 - \beta^2 - \alpha^2\sin^2\theta)^2}\right]$$

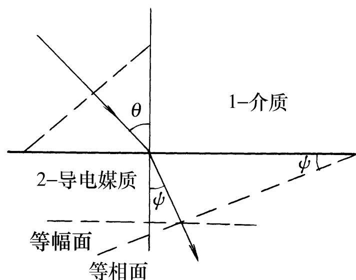
对于良导体,传导电流比位移电流大得多,有

$$\alpha \approx \beta \approx \sqrt{\frac{\omega\mu_2\sigma_2}{2}} \approx q$$

则得

$$\frac{\sin\psi}{\sin\theta} = \sqrt{\frac{2\omega\varepsilon_1\mu_1}{\mu_2\sigma_2}}$$

在导电媒质中由于电磁波的等幅面与等相面不一致,电磁波不是严格的横波。



波导 wave guide 引导电磁波沿设定方向转播的金属管道称波导管,简称波导。参见“波

导管”。

波导管 wave guide 以良导体(铜质内壁镀银)制成的管道,用来引导电磁波沿设定方向传播,以避免电磁波传播过程中的辐射损耗,管道截面呈矩形的称矩形波导管;截面呈圆形的称作圆柱形波导管。

表征波导管的重要特性量是它的截止频率。截止频率决定于波导管的截面形状和尺度,并和通过的电磁波模式有关。只有频率高于相应截止频率的那种模式的电磁波才能在波导管中通过;某一模式的电磁波,它的频率小于该模式的截止频率时,将在波导管中很快衰减,不能通过,可以利用波导的这个特性来阻扼或选择某些频率及模式的电磁波。

见“截止频率”。

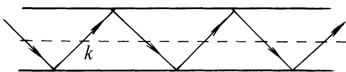
截止频率 cutoff frequency 在波导管中可能通过的电磁波的最低频率称为波导管的截止频率。截止频率的大小,与波导管横截面的尺寸以及传输的电磁波波型有关。

电磁波在波导管内实际上是在波导管壁上不断来回反射,曲折地沿着波导管轴(通常取 z 轴)传播,如图。电磁波在波导管横截面内,将是某种形式的驻波;沿管轴方向则取行波形式:$e^{ik_z z}$。以截面边长分别为 a 和 b 的矩形波导管为例,并设管中为真空,则有

$$k_z = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} - \left(\frac{m}{a}\right)^2 - \left(\frac{n}{b}\right)^2}。$$

这里 $m, n = 0, 1, 2, \cdots$;ω 是电磁波的角频率只有当 k_z 为实数时,电磁波方能传播。故对于 (m, n) 型波,截止(角)频率为

$$\omega_{c,mn} = \sqrt{\left(\frac{m}{a}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^2}。$$



波导传播常数 guide propagation constant 角频率为 ω 的电磁波,沿波导管轴线(设为 z 轴)传播时,其电场强度可表示为 $E(x, y)e^{i(k_g z - \omega t)}$。式中的 k_g 便称为该波导管的传播常数;实际上就是该电磁波的波矢量 k 在波导管轴线方向的分量 k_z。

波导衰减 attenuation of wave guide 电磁波沿波导管传播时,不可避免地总有部分电磁波透入波导管壁,损耗电磁能量(参见“表面电阻”),从而沿波导管传输的电磁波能量流不断衰减,这便是波导衰减。可以证明电磁波能量流沿波导管的轴线(设为 z 轴)呈现指数衰减:e^{-Kz}。这里衰减因子。

$$K = \frac{\text{单位长度波导管的功率损耗}}{\text{传输功率}}$$

四、电磁流体力学 *Electromagnetic Hydrodynamics*

磁流体力学 magnetohydro-dynamics 磁流体力学,又称电磁流体力学,是研究导电流体在磁场中运动的学科。导电流体运动时内部感生的电流改变着磁场;磁场则通过电流对流体作用机械力,影响流体的运动。因此,处理电磁流体力学的基本方程,必须是电磁学方程,流体力学方程以及热力学方程的联立。电磁流体力学是等离子气物理学、宇宙物理学、可控热核反应技术等研究领域的基础。

磁压 magnetic pressure 在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中,电导率很大,$\sigma \to \infty$ 的导电流体将磁场冻结,冻结的磁场除对流体有应力作用外,还对流体作用一全方位的流体静压力。这个静压力称为磁压。设流体密度为 ρ,流体机械静压强为 p,作用的其他力密度是 $\boldsymbol{f}$,则流体的运动方程是

$$\rho\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{u}}{\mathrm{d}t} = \nabla \cdot \Phi - \nabla p + \boldsymbol{f} = \nabla \cdot \left[\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{BB} + \left(-p - \frac{B^2}{2\mu_0}\right)\boldsymbol{I}\right] + \boldsymbol{f}$$

式中 $\frac{B^2}{2\mu_0}$ 项即是磁压强,这里 $\boldsymbol{u}$ 为流体速度;Φ 是电磁场应力张量,$\boldsymbol{I}$ 是单位张量。

还可以从下面的关系证实磁压。由麦克斯韦方程 $\boldsymbol{J} = \frac{1}{\mu_0}\nabla \times \boldsymbol{B}$ 电流受磁场作用的力密度为

$$\boldsymbol{f} = \boldsymbol{J} \times \boldsymbol{B} = \frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \boldsymbol{B}) \times \boldsymbol{B} = -\nabla\left(\frac{B^2}{2\mu_0}\right) + \frac{1}{\mu_0}(\boldsymbol{B} \cdot \nabla)\boldsymbol{B}$$

可见载流体受到静磁压 $p=\dfrac{B^2}{2\mu_0}$，并沿磁力线方向存在张力 $\dfrac{1}{\mu_0}(\boldsymbol{B}\cdot\nabla)\boldsymbol{B}$。

见“冻结效应”，“电磁应力张量”。

磁刚性 magnetic rigidity 在磁场中流动的导电流体具有冻结磁场（磁力线）的效应，导电流体与磁场相互作用产生一个垂直于磁力线的磁压强和沿着磁力线的张力。磁压强的效果是使磁通线反抗对它的横向作用；磁力线如果偏离平衡位置，磁张力则使它尽可能地缩短（拉直）。这两方面的作用都使磁力线显示“刚性”，称磁刚性。

见“冻结效应”，“磁压”。

磁扩散系数 magnetic diffusion coefficient 在静止的导电媒质中，由麦克斯韦方程组（Maxwell equations）略去位移电流，可导出磁场满足扩散方程：$\dfrac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}=K\nabla^2\boldsymbol{B}$。这里 $K=\dfrac{1}{\mu\sigma}$ 称为磁扩散系数，σ 和 μ 分别是媒质的电导率和磁导率。扩散方程表明磁场将在导电媒质中扩散；由于磁场的感应作用，磁场的初位形将在 $\tau=L^2/K$ 时间内衰减掉，L 是导电媒质的特征长度。

磁黏滞 magnetic viscosity 以一定速度运动的导电流体，由于磁场的作用而产生感应电流。磁场对感应电流的作用力阻碍流体运动，类似于流体的黏滞力，这一现象称磁黏滞。单位体积磁黏滞力的大小为 $\sigma u_{\perp}B^2$。这里 B 是磁场的磁感应强度；$u_{\perp}$ 是导电流体垂直于磁场方向的速度分量；σ 为电导率。

磁雷诺数 magnetic Reynolds number 在导电流体中，既有磁场冻结在流体中随流体一起运动的输运过程，又有磁场扩散的效应。为判断这两效应的相对强弱，引入磁流体的一个特征量——磁雷诺数，定义为 $R_M=\sigma u\mu_0 L$，这里 σ，u 分别是导电流体的电导率和运动速度的大小，L 则是与磁流体的运动范围可比拟的特征长度。若 $R_M\gg 1$，则输运过程超过扩散效应。虽然这个条件在实验室中是难以达到的，但在宇宙中由于 L 很大，这个条件很容易满足。

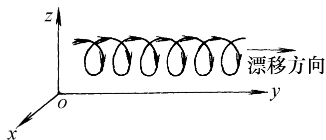
见“冻结效应”，“磁扩散系数”。

哈特曼数 Hartmann number 哈特曼数是磁流体力学的一个判据常数。磁场中，单位体积内导电流体磁黏滞力的数量级是 $\sigma B^2 u$。这里 $\boldsymbol{B}$ 是磁感应强度，σ 是电导率，u 是流体速度。而单位体积流体非磁性黏滞力的量级是 $\rho\nu u/L^2$，ρ 是质量密度，ν 为黏滞系数，L 是与流体流动区域尺度可相比的长度。引入哈特曼数：$M=BL\sqrt{\dfrac{\sigma}{\rho v}}$，如果 M 比 1 大得多就表明磁黏滞性大过普通的机械黏滞力。

见“磁黏滞”。

***S* 数 *S*-number** 在磁场中流动的导电流体具有冻结磁场的效应，磁场对流体施加应力作用。S 数则是用来判断磁场跟流体运动之间的相对重要性的量。S 数定义为单位体积内磁应力的量级 $\dfrac{1}{\mu}B^2$ 和流体以速率 u 运动时惯性力量级 ρu^2 的比值：$S=\dfrac{B^2}{\mu\rho u^2}$；它也可看作单位体积内的磁能 $\dfrac{\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B}}{2}$ 跟流体动能 $\dfrac{1}{2}\rho u^2$ 的比值。S 数小，表明磁场对流体的运动影响不大；反之，则流体运动受到磁场很强的控制作用；$S=1$ 时，运动能量和磁场能量均分。

荷电粒子的漂移 drifts of charged particle 在电磁场中，运动的荷电粒子一面受磁场力作用而围绕磁场作圆轨道转动，同时受电场或磁场不均匀性的影响，使回旋的轨道以一定的速度移动。如图所示。荷电粒子的这种螺旋式的总体运动称为漂移。

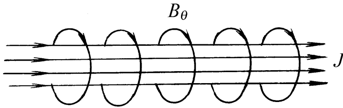


冻结效应 frozen-in effect 电磁场中的导电流体，若电导率很大（$\sigma\to\infty$），则穿过流体中随流体一起运动的任意闭合回路（构成面 S 的边界）的磁通量 $\Phi=\int_S \boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{s}$，将跟随回路运动而保持不变，好像将磁场“冻结”在流体中。这一现象称为磁场或磁通量线的冻结效应。

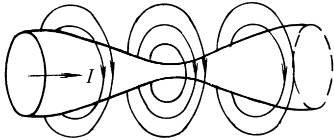
箍束效应 pinch effect 等离子体或导电流

体受自身磁场的约束,称箍束效应或约束效应。如图设一柱状的导电流体轴向通有电流密度 J 的电流,产生围绕轴线的磁场 B_θ。轴向电流受自身磁场作用有指向轴心的径向力,好像把电流柱加了箍一样加以约束。

见“磁压”。

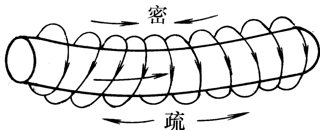


颈(腊肠)式不稳定 neck (sausage) instability 如图,若环绕导电流体(或等离子体)的箍束磁场,在某一位置处稍有增强,将导致该处径向磁压的增加,使那里的导电流体成瓶颈状,从而更增强该处及其邻近区域的磁场,形变进一步扩大而成不稳定。见“箍束效应”,“磁压”。



扭曲不稳定 kink instability 等离子体或导电流体内的柱形电流,如果发生如图所示那样的弯曲,则电流产生的环状磁力线在凹进处变得较密(磁场较强),凸出处则较疏(磁场较弱);流体在凹处受到的向轴磁压较凸处为大,促使电流柱的弯曲程度加大,造成箍束流体运动的不稳定。这种不稳定称为扭曲不稳定。

见“箍束效应”,“磁压”。



磁流体波 magnetohydrodynamic waves 导电流体中,若磁雷诺数(Reynolds’number) $R_M \to \infty$,磁场冻结条件成立,则磁场将产生垂直于磁力线方向的压强和沿磁力线方向的张力;若磁力线偏离平衡位置,就会出现恢复力,使磁力线在平衡位置附近振动,这种情景类似于绷紧的弦的振动那样。由此在导电流体中激发出一种新类型的波,称为磁流体波或阿尔芬波(Alfvén wave)。设磁感应强度 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{b}$,这里 $\boldsymbol{b}$ 是均匀场 $\boldsymbol{B}_0$(取作 z 方向)背景下的微小扰动场 $\boldsymbol{b} \ll \boldsymbol{B}_0$,则对于无耗散的均匀不可压流体,可由磁流体力学基本方程导出关于磁场和流体运动的波动方程:

$$\rho \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} = \frac{B_0}{\mu_0} \frac{\partial \boldsymbol{b}}{\partial z},$$

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{b}}{\partial z^2} - \frac{\rho\mu_0}{B_0^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{b}}{\partial t^2} = 0,$$

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial z^2} - \frac{\rho\mu_0}{B_0^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2} = 0$$

式中 $\boldsymbol{u}$ 和 ρ 分别是流体的速度和质量密度。波动方程表明磁流体波的相速为 $\sqrt{\frac{B_0^2}{\mu_0 \rho}}$。又由于流体是不可压缩的,存在条件 $\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$,从而 $\nabla \cdot \boldsymbol{b} = 0$;阿尔芬波是横波。

见“磁刚性”。

阿尔芬速度 Alfvén velocity 在磁感应强度为 $\boldsymbol{B}_0$ 的均匀磁场中,导电流体激发的磁流体力学波,其相位速度大小为 $v_A = \frac{B_0}{\sqrt{\mu_0 \rho}}$。磁流体力学波的传播速度称为阿尔芬(Alfvén)速度。式中 ρ 是导电流体的质量密度。

见“磁流体波”。

等离子体 plasma 对处于高度电离状态的气体,若正、负离子的空间电荷密度大体相等,整个气体呈中性,则这样的物质状态称为等离子体。在辉光放电、弧光放电、火焰、雷电,热核反应等高温过程中,气体将电离而出现等离子体状态;地球高空的大气电离层是等离子体,宇宙中更有大量的等离子体存在。

等离子体振荡 plasma oscillations

等离子体中电荷密度起伏的高频集体振荡,称为等离子体振荡。

在等离子体中,若由于外部的高频电磁场或热涨落引起电荷密度的起伏,致使某处负电荷相对集中(电荷密度呈负值),则必在其邻近出现过剩的正电荷(电荷密度为正),正负电荷间相互吸引的强大静电恢复力,导致电荷密度高频率的周期振荡。由于静电库仑力是长程力,

因而等离子体振荡将是某种集体振荡模式。如果不计离子的动力学效应,并略去碰撞因素,则等离子体振荡频率为:$\omega_p = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m}$。式中 e, m 分别为电子的电荷和质量,n_0 是平衡时单位体积内的电子数。

五、辐　射
Radiation

规范变换 gauge transformation 电磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 ϕ 作如下的变换称为规范变换:

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} - \nabla\chi;$$

$$\phi' = \phi + \frac{\partial\chi}{\partial t}$$

这里 χ 是坐标和时间的任意连续函数。经过这样的规范变换前、后的标量势和矢量势给出相同的电磁场强度:

$$\boldsymbol{E}' = -\nabla\phi' - \frac{\partial \boldsymbol{A}'}{\partial \boldsymbol{t}} = -\nabla\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}} = \boldsymbol{E};$$

$$\boldsymbol{B}' = \nabla\times\boldsymbol{A}' = \nabla\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$$

规范不变 gauge invariant 电磁场的标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 作规范变换后求得的电磁场强度保持不变;与之相关的物理量经过规范变换后不改变相关的物理定律。规范变换的这个特性称为规范不变。

见“规范变换”。

洛伦兹规范 Lorentz guage 对电磁场标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 要求满足洛伦兹条件所作的规范,称为洛伦兹规范。

见“洛伦兹条件”。

洛伦兹条件 Lorentz condition 要求电磁场标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 之间满足的如下规范条件,称为洛伦兹条件:

真空中:$\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial \boldsymbol{t}} = 0$;

媒质中:$\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \varepsilon\mu\frac{\partial\phi}{\partial \boldsymbol{t}} + \mu\sigma\phi = 0$。

洛伦兹条件不仅使 ϕ、$\boldsymbol{A}$ 分别满足的微分方程具有形式上的对称化,同时也保证了电磁场标量势和矢量势之间的相对论协变关系。

见“电磁势的达朗贝尔方程”,“洛伦兹条件的协变式”。

库仑规范 Coulomb guage 由于标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 对电磁场的确定不是惟一的,有可能对它们引进适当的限制条件。对矢量势 $\boldsymbol{A}$ 加上的限制条件:$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$,称为库仑规范条件;对 $\boldsymbol{A}$ 作出的这种规范称库仑规范。在库仑规范下,时变电磁场情形下,标量势 ϕ 由方程 $\nabla^2\phi(\boldsymbol{r}, t) = -\rho(\boldsymbol{r}, t)/\varepsilon_0$ 确定。这是瞬时的库仑势方程,库仑规范的名称由此而得。

自由空间中,可取库仑规范条件为 $\phi = 0$,$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$。

库仑规范是一种横场条件;例如对于单色平面电磁波,将 $\boldsymbol{A}$ 场表示为 $\boldsymbol{A}_0 e^{i(\kappa\cdot\gamma-\omega t)}$,库仑规范给出 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A} = 0$,即场的振动方向与传播方向垂直。

辐射规范 radiation gauge 电磁场在随时间变化的不稳定情形下,对矢量势 $\boldsymbol{A}$ 加上条件 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$ 的规范称为辐射规范。实际上这是一种横场条件。例如对于单色平面电磁波,将 $\boldsymbol{A}$ 场表示为 $\boldsymbol{A}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\gamma-\omega t)}$,辐射规范给出 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{A} = 0$,即场的振动方向与传播方向垂直。

见“库仑规范”。

第一类规范变换 the first kind guage transformation 见“第二类规范变换”。

第二类规范变换 the second kind guage transformation 量子力学中,粒子波函数 ψ 满足薛定谔定程:$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial \boldsymbol{t}} = \hat{H}\psi$,式中 $\hat{H}$ 是粒子的哈密顿算符。

不存在电磁场时,保守场中粒子的哈密顿函数为 $H = \frac{p^2}{2m} + V$,则 ψ 和 $\psi' = \psi e^{-i\alpha}$ 都同样是薛定谔方程的解。这里 α 是一常数。波函数 $\psi \rightarrow \psi'$ 的变换,称为第一类规范变换。

在电磁场中运动的荷电粒子,其非相对论哈密顿函数为 $H = \frac{(P - q\boldsymbol{A})^2}{2m} + q\phi$。电磁势作规范变换 $\boldsymbol{A}\rightarrow\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} - \nabla\chi$, $\phi\rightarrow\phi' = \phi + \frac{\partial\chi}{\partial \boldsymbol{t}}$ 将导致薛定谔方程波函数的解由 ψ 变换为 $\psi' = \psi e^{-iq\chi}$。波函数的这一变换称为第二类变换。见“运动电荷的哈密顿函数”。

电磁势的达朗贝尔方程 D'Ale-mbert

equations for electromagnetic potentials 在洛伦兹规范条件下，电磁场的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 ϕ 满足如下的达朗贝尔方程：

（1）真空情形

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}^2} = -\mu_0 \boldsymbol{j},$$

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \boldsymbol{t}^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

（2）介质情形

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}^2} - \mu\sigma \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}} = -\mu \boldsymbol{j}',$$

$$\nabla^2 \phi - \varepsilon\mu \frac{\partial^2 \phi}{\partial \boldsymbol{t}^2} - \mu\sigma \frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{t}} = -\frac{\rho}{\varepsilon}$$

式中 $\boldsymbol{J}' = \sigma \boldsymbol{E}'$，是外电动势生成的电流，并不包括导体内电磁场的感应电流。

见“洛伦兹条件”。

辐射条件 radiation condition 分布在有限区域内的时变电荷、电流系激发的定态电磁场强 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$，在自由空间中，都满足如下形式的亥姆霍兹方程：$\nabla^2 g + \boldsymbol{k}^2 g = 0$。对于辐射场的解，要求当 $r \to \infty$ 时场强 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 趋于 0，且 $\lim(rg)$（$\lim r\boldsymbol{E}$ 及 $\lim r\boldsymbol{B}$）有界。然而这还不能充分确定是辐射场解。因为亥姆霍兹方程存在着自辐射源发散和向辐射源会聚的两种解。为排除会聚解，还需补充一个条件：

$$\lim_{r\to\infty} r\left(\frac{\partial g}{\partial r} - \mathrm{i}kg\right) = 0$$

以保证得到向外发散的辐射场解。这个条件便称为“辐射条件”。

见“辐射场”，“推迟势”。

超势 superpotential 标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足洛伦兹规范条件 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{t}} = 0$；它们不是相互独立的，分别可以用一个矢量函数 $\boldsymbol{Z}(x, y, z, t)$ 表示：

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial \boldsymbol{t}};$$

$$\phi = -\nabla \cdot \boldsymbol{Z}$$

这里引进的矢量函数 $\boldsymbol{Z}(x, y, z, t)$ 可看成电磁场标势 ϕ 和矢势 $\boldsymbol{A}$ 的“势”，称电磁场的超势。电磁场也可以直接由超势求得。令 $\boldsymbol{C} = \nabla \times \boldsymbol{Z}$，则有 $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial \boldsymbol{t}}$，$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}} = \nabla \times \boldsymbol{C}$。可见由 $\boldsymbol{Z}$ 的三个分量就可求得电磁场 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 共六个分量。但需注意，这里关于磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的表式恒成立，但仅在 $\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0$ 条件下 $\boldsymbol{E}$ 的表式才成立。

赫兹势（见“赫兹矢量”）和磁化势（见“磁化势”）都是超势。

赫兹矢量 Hertz vector 赫兹矢量又称为赫兹势。由洛伦兹规范条件

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{t}} = 0。$$

可见电磁场的标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 不是相互独立的，它们可以用一个矢量函数 $\boldsymbol{Z}(x, y, z, t)$ 分别表示为：

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{Z}}{\partial \boldsymbol{t}};$$

$$\phi = -\nabla \cdot \boldsymbol{Z}$$

ϕ 满足达朗贝尔方程：

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial \boldsymbol{t}^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

此外，由电荷、电流连续性方程，可引入单一“极化矢量”函数 $\boldsymbol{p}$，使

$\rho_f(x, y, z, t) = -\nabla \cdot \boldsymbol{p}(x, y, z, t)$；$j_f(x, y, z, t) = \dfrac{\partial \boldsymbol{p}(x, y, z, t)}{\partial t}$

则矢量 $\boldsymbol{Z}$ 可由方程

$$\nabla^2 \boldsymbol{Z} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{Z}}{\partial t^2} = -\frac{\boldsymbol{p}}{\varepsilon_0}$$

解出。如上引进的矢量 $\boldsymbol{Z}$ 即是赫兹矢量，或称赫兹势。

见“超势”。

磁化势 magnetization potential 电磁场的标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 不是相互独立的，存在洛伦兹规范条件：$\nabla \cdot \boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \phi}{\partial \boldsymbol{t}} = 0$. 由此可引入一个矢量函数 $\boldsymbol{Z}_m(x, y, z, t)$ 使

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \boldsymbol{Z}_m}{\partial \boldsymbol{t}},$$

$$\phi = -\nabla \cdot \boldsymbol{Z}_m$$

此外，矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足达朗贝尔方程（D'Alembert's equation）：$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{t}^2} = -\mu_0 \boldsymbol{J}$。若再定义“磁化”函数 $\boldsymbol{m}$ 与电流密度的关系为 $\boldsymbol{J}(x, y, z, t) = \nabla \times \boldsymbol{m}(x, y, z, t)$，则

矢量 $\boldsymbol{Z}_m$ 可由方程

$$\nabla^2 \boldsymbol{Z}_m - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{Z}_m}{\partial t^2} = -\frac{\boldsymbol{m}}{\mu_0}$$

解出。如上引进的矢量 $\boldsymbol{Z}_m$ 称为磁化势。

见“超势”。

推迟势 retarded potential 真空电磁场的标量势，在洛伦兹规范条件下，满足达朗贝尔方程：

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$$

此标量势方程具有解

$$\phi(\boldsymbol{r},t) = \phi_R + \phi_A$$

$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho\left(\boldsymbol{r}', t-\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V' + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho\left(\boldsymbol{r}', t+\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V'$$

其中

$$\phi_R(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho\left(\boldsymbol{r}', t-\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V'$$

称为电磁场的推迟标量势。此式表明，位于 $\boldsymbol{r}'$ 位置的电荷需推迟时间 $t = r/c$，才能对离开它 $\boldsymbol{r}$ 位置处的电势发生影响；即电荷对场的影响是以光速传递的。解中的另一项

$$\phi_A(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho\left(\boldsymbol{r}', t+\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V'$$

称为超前势，表明电荷分布对电势具有超前的影响；显然这是不符合因果关系的，因而超前势没有物理意义，客观上并不存在，仅仅是数学上的解。

真空电磁场的矢量势满足类似的达朗贝尔方程，数学上同样存在推迟和超前的矢量势解：

$$\boldsymbol{A}_R(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{r}', t-\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V'$$

$$\boldsymbol{A}_A(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{r}', t+\frac{r}{c}\right)}{r}\mathrm{d}V'$$

物理上只存在推迟的矢量势解 $\boldsymbol{A}_R(\boldsymbol{r},t)$。

超前势 advanced potential 见“推迟势”。

发射理论 emission theory 在狭义相对论出现之前，人们认为电磁波（光波）的传播速度与（光）源有关，基于这一思想而修改电动力学方程，由此而建立的理论称为发射理论。发射理论是在爱因斯坦狭义相对论建立之前，企图将电磁波（光波）的传播纳入伽利略相对论范畴的尝试。

见“里兹发射理论”。

里兹发射理论 Ritz emission theory 里兹（Ritz）发射理论是探索波源发射电磁波的发射理论之一。在里兹发射理论中，保留麦克斯韦方程组中的两个方程：$\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$，$\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$；以及 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的关系式：$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$。但加进了与波源（光源）速度相关的因素，体现在下面的两个推迟势表式中：

$$\phi = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho[\boldsymbol{r}', t-\boldsymbol{r}/(c+v_r)]}{r}\mathrm{d}v'$$

$$\boldsymbol{A} = \frac{\mu_0}{4\pi}\int \frac{\boldsymbol{J}[\boldsymbol{r}', t-\boldsymbol{r}/(c+v_r)]}{r}\mathrm{d}v'$$

式中 $\boldsymbol{r}'$ 是源点的位矢，$\boldsymbol{r}$ 则为相对于源点的场点位矢；v_r 是波源（光源）速度 v 在 $\boldsymbol{r}$ 方向的分量。对于光束垂直镜面反射的干涉实验，里兹理论能在 $\frac{v^2}{c^2}$ 量级精度下符合。

见“发射理论”。

辐射场 radiation field 在由随时间变化的电荷系所激发的电磁场中，存在着 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 与离开激发源的距离成反比 $\left(\propto\frac{1}{r}\right)$ 的电磁场，这是远离电荷系区域内存在的主要电磁场，称为辐射场。辐射场的能流密度 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}\propto\frac{1}{r^2}$，因而单位时间内通过包围电荷系的任意闭合面的电磁能量时间平均值相等。辐射场一旦被激发，即能脱离激发源而以电磁波的形式向外传播。由辐射电磁波传递的能量称为辐射能。

多极辐射 multipole radiation 电（磁）偶矩及更高阶的矩称为电（磁）多极矩。具有多极矩的电荷（电流）系，统称为电多极子。随时间变化的电（磁）多极子激发电磁辐射场的现象，称为多极辐射。

见“多极子”，“电偶极辐射”，“电四极辐射”，“磁偶极辐射”各条。

电偶极辐射　electric dipole radiation　分布在小区域内的电荷系，其相应的电偶矩随时间变化时的电磁辐射，称为电荷系的电偶极辐射。电偶极辐射场的标量势和矢量势分别为

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\frac{\dot{\boldsymbol{P}}\left(t-\frac{\boldsymbol{r}}{c}\right)\cdot\boldsymbol{r}}{4\pi\varepsilon_0 c\boldsymbol{r}^2},$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\dot{\boldsymbol{P}}\left(t-\frac{\boldsymbol{r}}{c}\right)}{4\pi\varepsilon_0 c^2\boldsymbol{r}}。$$

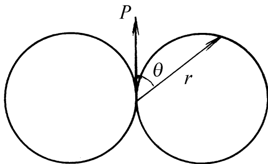
电偶极辐射的辐射电磁场强，分别为

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\left(\boldsymbol{P}\left(t-\frac{r}{c}\right)\cdot\boldsymbol{r}\right)\boldsymbol{r}}{4\pi\varepsilon_0 c^2\boldsymbol{r}^3}-\frac{\boldsymbol{P}\left(t-\frac{\boldsymbol{r}}{c}\right)}{4\pi\varepsilon_0 c^2\boldsymbol{r}},$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\boldsymbol{P}\left(t-\frac{r}{c}\right)\times\boldsymbol{r}}{4\pi\varepsilon_0 c^3\boldsymbol{r}^2},$$

式中，$\boldsymbol{P}(t)=\int_{V'}\boldsymbol{r}'\rho(\boldsymbol{r}',t)\mathrm{d}\tau'$ 是小区域 V 电荷系的电偶矩，$\rho(\boldsymbol{r}',t)$ 为电荷密度。

若电荷系的电偶矩以角频率 ω 按 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ 变化，则电偶极辐射能流密度的时间平均值为 $\bar{S}=\frac{\omega^4P_0^2}{32\pi^2\varepsilon_0c^3r^2}\sin^2\theta$。辐射功率的角分布如图所示。易见，在偶极矩振动方向的辐射为零，垂直于偶极矩方向的辐射最强，偶极辐射的平均辐射功率为 $W=\frac{\omega^4P_0}{12\pi\varepsilon_0c^3}$。



电四极辐射　electric quadrupole radiation　位于微小区域内随时间变化的电荷系，将激发辐射电磁场；由电荷系的电四极矩激发辐射场，称为电四极辐射。设电荷系的电四极矩张量为 $\boldsymbol{D}$，位矢 $\boldsymbol{r}$ 的单位矢量是 $\boldsymbol{e}_r$，定义矢量 $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{e}_r$ 则在真空中，远离电荷系 $\boldsymbol{r}$ 处的电四极辐射场为

$$\boldsymbol{E}_D=\frac{([\dddot{\boldsymbol{D}}]\times\boldsymbol{r})\times\boldsymbol{r}}{24\pi\varepsilon_0c^3\boldsymbol{r}^3},$$

$$\boldsymbol{B}_D=\frac{[\dddot{\boldsymbol{D}}]\times\boldsymbol{r}}{24\pi\varepsilon_0c^4\boldsymbol{r}^2}$$

式中 $[\dddot{\boldsymbol{D}}]$ 为 $\boldsymbol{D}$ 对推迟时间的三阶导数：

$$[\dddot{\boldsymbol{D}}]=\left.\frac{d^3\boldsymbol{D}(t')}{dt'^3}\right|_{t'=t-\frac{r}{c}}$$

磁偶极辐射　magnetic dipole radiation　电荷、电流随时间变化时，在其周围将激发辐射电磁场，由电荷-电流系相应的磁偶矩 m 随时间变化激发辐射场，称为磁偶极辐射。

位于坐标原点附近的小区域内电流系的磁偶矩，在真空中激发的辐射电磁场强为

$$\boldsymbol{E}=-\frac{\mu_0[\ddot{\boldsymbol{m}}]\times\boldsymbol{r}}{4\pi cr^2};$$

$$\boldsymbol{B}=\mu_0\frac{([\ddot{\boldsymbol{m}}]\times\boldsymbol{r})\times\boldsymbol{r}}{4\pi c^2r^3}$$

式中 $\boldsymbol{r}$ 是场点的位置矢量；$[\ddot{\boldsymbol{m}}]=\left.\frac{d^2\boldsymbol{m}(t')}{dt'^2}\right|_{t'=t-\frac{r}{c}}$ 为磁矩 $\boldsymbol{m}$ 对于推迟时间的二阶导数。

辐射能　radiation energy　辐射电磁场传递的电磁能量，称为辐射能。

单位时间内穿过任一包围辐射源闭合面的辐射能为 $U=\oiint\boldsymbol{S}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{s}$，它的时间平均值即是平均辐射功率，这里 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$ 是辐射电磁场的坡印亭矢量。

见“辐射场”。

辐射功率　radiation power　见“辐射率”。

辐射率　radiation rate　随时间变化的电荷、电流体系单位时间内辐射的辐射能，称为电荷、电流体系的辐射率或辐射功率。见“辐射能”。

辐射压力　radiation pressure　辐射电磁场被介质吸收或反射时，电磁场作用于介质的力即是辐射压力，例如，一沿 z 方向传播的线偏振平面电磁波：$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{e}_xE_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$、$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{e}_yB_0\times\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$，垂直地入射于介质表面（$z=0$ 平面），被介质完全吸收，则电磁场作用于介质表面单

位面积上的辐射压力(压强)的时间平均值为

$$\overline{P} = \Phi\Big|_{z=0} \cdot \boldsymbol{n} = -\Phi\Big|_{z=0} \cdot \boldsymbol{e}_z$$
$$= \frac{1}{2}\left(\overline{E^2} + \overline{B^2}\right)_{z=0} \boldsymbol{e}_z$$

这里 Φ 是电磁场的应力张量,$\boldsymbol{n} = -\boldsymbol{e}_z$ 是介质表面的法向单位矢量。

见“电磁场应力张量”。

辐射脉冲 radiation pulse 空间任意位置处,仅在有限时间内存在的辐射电磁场,称为辐射脉冲。电磁场的辐射脉冲,可分解为各种频率的电磁波叠加。

六、带电粒子和电磁场 *Charged Particle and Electromagnetic Field*

阿哈伦诺夫-博姆效应 Aharonov-Bohm effect 电磁场标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 对于带电粒子量子状态的量子干涉现象的影响,称为阿哈伦诺夫-博姆效应。由此表明电磁场强度 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 并不能完全表征电磁场连续统。

众所周知,电磁场强可藉:$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$,$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ 求得。但 A 和 ϕ 不是惟一的,作规范变换:$\phi' = \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}$,$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi$ 后,场强不受影响。因而在经典电动力学中电磁势只是用来计算场强的辅佐量,并无实质的物理意义。电磁场中运动带电粒子的经典力学方程中,出现的场量是场强;在相对论或量子力学中,粒子运动方程中出现的场量则是 A 和 ϕ。但经过规范变换,粒子波函数仅有一相位因子的改变,不影响物理过程的实质。因而通常认为即使在量子力学中,矢量势和标量势也没有实质意义,1959 年阿哈伦诺夫(Y. Aharonov)和博姆(D. Bohm)对电子束的量子干涉现象所作的讨论 *Phy. Rev.* **115**, 485, (1959),指出上述结论并不正确。当两相干电子束通过电磁势场后,它们波函数的相位差是 $\frac{\Delta S}{\hbar} = \frac{e}{\hbar}\oint(\varphi \mathrm{d}t - \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r})$,从而引起量子干涉现象,尽管电子束路径通过的空间 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{B} = 0$(但 ϕ 和 $\boldsymbol{A}$ 却可不为 0)。例如电子的双缝干涉实验,装置如图 1 所示,在两缝之间的屏后紧置一直径很小的无限长密绕螺线管,在螺线管通有稳恒电流前后,观察屏上的电子干涉图像移动了 Δx。这表明磁通量对于荷电粒子量子态的量子干涉现象的影响。这一现象是经典电磁学不能解释的。因为无论从经典电磁学,量子电动力学或相对论观点,电荷与场的相互作用应当是局域的,然而这里两电子束的相位差

$$\frac{\Delta S}{\hbar} = -\frac{e}{\hbar}\oint \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = -\frac{e}{\hbar}\iint \boldsymbol{B} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{s}$$
$$= -\frac{e}{\hbar}\Phi$$

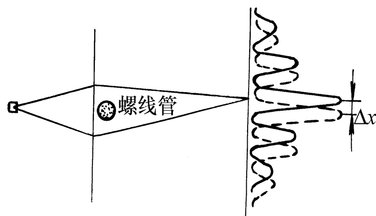


图 1 Aharonov-Bohm 效应

虽然与螺线管内的磁感应强度 $\boldsymbol{B}$,或两电子束路径包围的磁通量相关联,但由于螺线管外 $\boldsymbol{B} = 0$(但 $\boldsymbol{A}$ 不为 0)因而场强 B 的作用是非局域的。这个量子效应的实验显示,在某些区域中,电磁场强度 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$ 不足以表征电磁连续统的状态。

见“电磁场能量密度”。

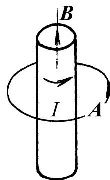


图 2 螺旋管外部

$\boldsymbol{B} = 0, \boldsymbol{A} \neq 0$

不可积分相因子 nonintegrable phase factor 为解释荷电粒子波量子干涉的阿哈荣诺夫-玻姆效应,杨振宁等人提出了不可积分相因子概念,定义为:$R = \exp\left[\frac{iq}{\hbar}\int(\phi \mathrm{d}t - \boldsymbol{A} \cdot\right.$

$\mathrm{d}\boldsymbol{r})\Big]$，他们认为在量子力学中是这个相因子表征着粒子与电磁场的互作用；它可作为一种表述电磁学的基础。这里 q 是粒子的电荷，ϕ 和 $\boldsymbol{A}$ 分别是电磁场的标量势和矢量势。积分是对电磁势沿四维时空世界线进行的，显然是一四维标量，具洛伦兹不变性。

见“阿哈伦诺夫-博姆效应”。

李纳-维谢尔势 Lienard-Wiechert potentials 李纳-维谢尔势是高速运动的带电粒子激发的电磁场标量势和矢量势，它们都是推迟势。电荷 q 的带电粒子以速度 $\boldsymbol{v}$ 运动时，李纳-维谢尔势为

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{q}{R - \frac{\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}}{c}}\right];$$

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi}\left[\frac{q\upsilon}{R - \frac{\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{v}}{c}}\right]$$

式中 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'(t)$ 是场点相对于带电粒子的位矢；方括号内各量的时间变量 t 都要用推迟的时间 t' 代入，$t' = t - \frac{R(t')}{c}$。

见“推迟势”。

运动带电粒子的电磁场 electro-magnetic field of a moving charged particle 由运动带电粒子的李纳-维谢尔(Lienard-Wiechert)势，可求出电荷为 q，以速度 $\boldsymbol{v}$ 运动的带电粒子的电磁场强

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = -\nabla\phi - \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$$

$$= \frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{\left(1 - \frac{\boldsymbol{v}}{c^2}\right)^2}{\left(R - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}\right)^3}\left(\boldsymbol{R} - \frac{\boldsymbol{v}}{c}R\right)\right.$$

$$\left. + \frac{1}{c^2\left(R - \frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}\right)^3}\boldsymbol{R}\times\left(\boldsymbol{R} - \frac{\boldsymbol{v}}{c}R\right)\times\boldsymbol{\upsilon}\right]$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{c}\left[\frac{\boldsymbol{R}}{R}\right]\times\boldsymbol{E}$$

式中 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'(t)$ 是场点相对于带电粒子的位矢；方括号内各量的时间变量 t 都要代以推迟的时间 t'，$t' = t - \frac{R(t')}{c}$，代入。

由上面电场强度 $\boldsymbol{E}$ 的表示式可见，第一项 $\propto \left[\frac{1}{R^2}\right]$ 与粒子加速度无关，相应的电场 $\boldsymbol{E}_1$ 和磁场 $\boldsymbol{B}_1 = \left[\frac{\boldsymbol{R}}{R}\right]\times\boldsymbol{E}_1$ 是依附于带电粒子的静电性电场；第二项正比于粒子的加速度，且 $\propto \left[\frac{1}{R}\right]$，相应的电场 $\boldsymbol{E}_2$ 和磁场 $\boldsymbol{B}_2 = \left[\frac{\boldsymbol{R}}{R}\right]\times\boldsymbol{E}_2$ 是为带电粒子的辐射场。真空中匀速运动的带电粒子，加速度为 0，不存在辐射电磁场，相应的电磁场为

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \frac{q\left(1 - \frac{\boldsymbol{v}}{c^2}\right)^2\boldsymbol{R}_0}{4\pi\varepsilon_0\left(R_0^2 - \left(\frac{\boldsymbol{R}_0\times\boldsymbol{v}}{c}\right)^2\right)^{3/2}},$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{c^2}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}$$

若带电粒子匀速运动的速度很小，$\boldsymbol{v} \ll c$，则电磁场近似于库仑静电性场和由毕奥-萨伐尔(Biot-Savart)定律确定的稳恒性磁场：

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q\boldsymbol{R}_0}{R_0^3},$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{q\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{R}_0}{R_0^3}$$

注意，这里 R_0 是 t 时刻场点与粒子间的即时距离。

介质中，作均速运动的荷电粒子速度大于介质中的光速 $|\boldsymbol{v}| > \frac{c}{n}$，则可能发生切伦可夫辐射。

见“李纳-维谢尔势”，“切伦可夫辐射”。

感应场 induction fields 运动电荷系统激发的电磁场中，场强($\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{B}$) $\propto \frac{1}{r^2}$(r 为场点与电荷间的距离)的那部分电磁场称为运动电荷的感应场。它主要分布在运动电荷的附近，与电荷不能分离。运动电荷的感应场有时也称为运动电荷的“自有场”。见“辐射场”。

运流势 convection potential 以同样速度 $\boldsymbol{v}$ 平行运动的两个带有同样电荷 q 的荷电粒子，一个粒子在另一粒子的场中受到作用力

$$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times B)$$

这里电场和磁场都是在实验室坐标系中测量的，由李纳-维谢尔势求出。可以证明，力 $\boldsymbol{F}$

可表示为一势函数 U 的梯度：$\boldsymbol{F}=-\nabla U$，这里

$$U=\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0\left(r-\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{v}}{c}\right)}\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)$$

称为运流势。

见“李纳-维谢尔势”，“运动带电粒子的电磁场”。

韧致辐射 bremsstrahlung 荷电粒子通过媒质时与媒质原子碰撞而加(减)速，从而发生电磁辐射。由上述原因造成的辐射现象，称为韧致辐射；韧致辐射粒子的加速度平行于速度 $\dot{\boldsymbol{v}}\parallel\boldsymbol{v}$。高速电子打击金属靶产生 X 射线辐射就是韧致辐射。直线加速器中荷电粒子的辐射也是韧致辐射。韧致辐射的辐射电磁场强为

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0c^2}\left[\frac{\boldsymbol{R}\times(\boldsymbol{R}\times\dot{\boldsymbol{v}})}{\left(R-\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}\right)^3}\right],$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{cR}\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{E}$$

式中 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'(t)$ 是场点相对于带电粒子的位矢；方括号内各量的时间变量都要用推迟时间 t' 代替 $t\to t'$；$t'=t-\frac{R(t')}{c}$。

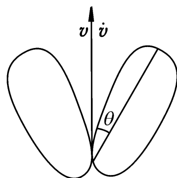
如图所示，辐射功率角分布

$$\frac{\mathrm{d}W(t')}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{q^2\dot{v}^2}{16\pi^2\varepsilon_0c^3}\frac{\sin^2\theta}{\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^5}$$

辐射功率

$$W(t')=\frac{q^2\dot{v}^2}{6\pi\varepsilon_0c^3\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^3}$$

见“运动带电粒子的电磁场”



圆轨道辐射 circular orbital radiation 圆轨道辐射是指带电粒子作圆周运动时的电磁辐射，其特点是粒子的加速度垂直于速度 $\dot{\boldsymbol{v}}\perp\boldsymbol{v}$，辐射电磁场强分别为

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{t})=\frac{q}{4\pi\varepsilon_0c^2}\left[\frac{\boldsymbol{R}\times\left[\left(\boldsymbol{R}-\frac{\boldsymbol{v}}{c}R\right)\times\dot{\boldsymbol{v}}\right]}{\left(R-\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{R}}{c}\right)^3}\right],$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{c}\left[\frac{\boldsymbol{R}}{R}\right]\times\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)$$

式中 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'(t)$ 是场点相对于带电粒子的位矢；方括号内各量的时间变量 $\boldsymbol{t}$ 都要用推迟的时间 $\boldsymbol{t}'$ 代替；$t'=t-\frac{R(t')}{c}$。

如图所示，辐射角分布

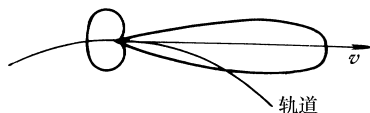
$$\frac{\mathrm{d}W(t')}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{q^2\dot{v}^2}{16\pi^2\varepsilon_0c^3}\frac{\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^2-\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)\sin^2\theta\cos^3\varphi}{\left(1-\frac{v}{c}\cos\theta\right)^5}$$

这里 θ 是场点相对于粒子的推迟位矢与 $\boldsymbol{v}$ 间的夹角，φ 是围绕 $\dot{\boldsymbol{v}}$ 的方位角。

辐射功率

$$\boldsymbol{W}(t')=\frac{q^2\dot{v}^2}{6\pi\varepsilon_0c^3\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^2}$$

见“运动带电粒子的电磁场”



荷电粒子近光速运动的圆轨道辐射称同步辐射；速度比光速 c 小很多时的圆轨道辐射，则称回旋辐射。

拉莫公式 Larmor formula 在非相对论情形下，荷电粒子加速运动时的辐射总功率 P 由下式表示：

$$P=\frac{q^2\dot{v}^2}{6\pi\varepsilon_0c^3}$$

或

$$P=\frac{2}{3}\frac{q^2\dot{v}^2}{c^3}\text{(高斯单位制)}$$

这一公式称为拉莫公式。式中 q 是粒子的电荷，$\dot{\boldsymbol{v}}$ 是粒子的加速度。洛伦兹变换下拉莫公式的协变表述为

$$P=\frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0mc^3}\left(\frac{\mathrm{d}p_\mu}{\mathrm{d}\tau}\frac{\mathrm{d}p_\mu}{\mathrm{d}\tau}\right)$$

式中 p_μ 为动量的四维分量；$d\tau$ 是原时间隔；对重复的足码 μ 由 1 至 4 求和。

李纳公式 Lienard formula　由加速运动电荷辐射总功率的相对论协变式，在电荷的速度 $\boldsymbol{v}$ 甚小于光速时可导出如下的近似表示式：

$$P=\frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 c}\gamma^6[(\dot{\beta})^2-(\beta\times\dot{\beta})^2],$$

或

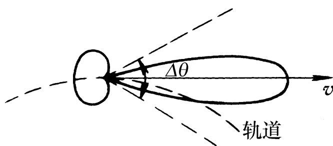
$$P=\frac{2}{3}\frac{q^2}{c}\gamma^6[(\dot{\beta})^2-(\beta\times\dot{\beta})^2]\text{（Gauss 单位制）}$$

这个表达式称为李纳公式。式中，$\beta=\frac{\boldsymbol{v}}{c}$，$\gamma=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ 见“拉莫公式”。

辐射角分布的角宽 angular width of radiation angular distribution　荷电粒子辐射电磁场，其辐射能量角分布的两节线（辐射强度为 0 的方向）之间的夹角，称为辐射角分布的角宽，例如带电粒子作圆轨道辐射时，主要的辐射区位于粒子运动的前方，如图实线所示。图中两条虚直线所示的方向，辐射强度为 0，它们之间的夹角 $\Delta\theta$ 即为圆轨道辐射的辐射角分布角宽。粒子的速度 $\boldsymbol{v}$ 越大，角宽越小；若

$$\gamma=\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\gg 1,$$

则 $\Delta\theta=\frac{1}{\gamma}$。见“圆轨道辐射”。



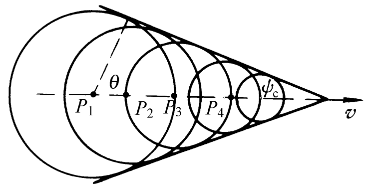
切伦可夫辐射 Čerenkov radiation　1934 年，切伦可夫（Čerenkov）首先发现液体在 γ 射线作用下，发出淡蓝紫色的光，且具有连续光谱。后来证实这是一种新的辐射现象，是电子在介质中以高于介质中的光速 c/n 作匀速运动时激发的电磁辐射现象，称为切伦可夫辐射。

我们知道，真空中作匀速直线运动的荷电粒子并不引起辐射，何以在介质中会引起辐射呢？首先，这是运动荷电粒子与介质中束缚电荷的一种合作效应。当荷电粒子通过折射率为 n 的介质时，引起介质中束缚电荷的加速运动，从而激发次波如图。若粒子速度 $v>c/n$，其本身的电磁场跟介质的电磁次波在半顶角为 ψ_c 的锥面附近重叠、干涉形成极强的区域电磁场；在与锥面垂直的方向引起辐射。其次，由介质中匀速运动电荷的电磁场强表式

$$\boldsymbol{E}=\frac{q(1-v^2n^2/c^2)}{4\pi\varepsilon_0 R^3(1-v^2n^2\sin^2\psi/c^2)^{3/2}}\boldsymbol{R},$$

$$\boldsymbol{B}=\frac{n}{cR}\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{E}$$

分母中出现因子 $(1-v^2n^2\sin^2\psi/c^2)^{3/2}$，这里 ψ 是场点相对于粒子即时位置的位矢 $\boldsymbol{R}$ 与粒子前进方向的夹角；当 $v>c/n$ 时在 $\psi_c=\sin^{-1}(c/vn)$ 方向出现电磁场奇异，减弱了随距离 $\propto\frac{1}{R^2}$ 的衰减，从而具有能量辐射。



辐射反作用 radiation reaction　作加速运动的荷电粒子，由于激发辐射电磁场而导致自身能量的减少，等同于荷电粒子的运动受到辐射场的阻碍作用。这一阻碍作用称为辐射反作用，或辐射阻尼。根据适当时间内的能量平衡，可得作用于粒子的辐射反作用力（辐射阻尼力）为

$$\boldsymbol{F}=\frac{q^2\ddot{u}}{6\pi\varepsilon_0 c^3}=\frac{q^2\dddot{\boldsymbol{r}}}{6\pi\varepsilon_0 c^3}。$$

式中 q 是电荷的电量，$\boldsymbol{u}$ 是运动电荷的速度。

见“辐射阻尼力”。

辐射阻尼力 radiative damping force　当带电粒子激发辐射电磁场时，随着电磁能量的辐射，带电粒子自身的能量随之减少，等价于粒子受到了辐射场的阻尼作用。辐射电磁场对于带电粒子施加的反作用，便是“辐射阻尼力”。从辐射场对带电粒子的自力计算，可求得辐射阻尼力为 $\boldsymbol{F}_r=\frac{e^2\dot{\boldsymbol{a}}}{6\pi\varepsilon_0 c^3}$，这里 $\dot{\boldsymbol{a}}$ 是粒子加速度的时间变化率。

见“辐射反作用”。

脱逸解 run-away solution 对于荷电粒子的阿布拉罕-洛伦兹运动方程(见“阿布拉罕洛伦兹运动方程”),在无外(场)力,$\boldsymbol{F}_{\text{ext}}=0$,时

$$m\dot{\boldsymbol{v}}-\frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\ddot{v}=0$$

存在脱逸解:

$$\dot{\boldsymbol{v}}(t)=\boldsymbol{a}_0\boldsymbol{e}^{t/\tau}$$

式中 $\boldsymbol{a}_0$ 是 $t=0$ 时粒子的加速度;$\tau=\dfrac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\approx10^{-23}$ 秒。显然,脱逸解表示荷电粒子在没有外力作用下能自发加速运动,而且加速度的方向并不一定与速度垂直;这与常理不符,这个解是无意义的。

阿布拉罕-洛伦兹电子模型 Abraham-Lorentz model of electron 为恰当地计算电子自有场对其自身的反作用力,必须考虑电子的电荷结构和它的自场。阿布拉罕(M. Abraham)和洛伦兹(H. A. Lorentz)假设电子的电荷球对称地分布在半径为 r_0 的球体内;在计算自作用力时,认为电子是瞬时静止的。这样可得阿布拉罕-洛伦兹模型下粒子的牛顿运动方程(见“阿布拉罕-洛伦兹运动方程”):

$$\left(\frac{4U_0}{3c^2}\right)\dot{\boldsymbol{v}}-\frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\ddot{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{F}$$

式中 $U_0\approx\dfrac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \boldsymbol{r}_0}$ 是电子的库仑静电自能;左方第二项是辐射阻尼。阿布拉罕,洛伦兹等人还假设,电子基本上不存在非电磁性的质量,主要的是电磁质量 $m_{\text{e,m}}=\dfrac{4U_0}{3c^2}$。见“电磁质量”,“电子的经典半径”。

虽然阿布拉罕-洛伦兹模型是对电子描写迈出了有意义的一步,但存在着一些明显的困难:(1)运动方程是不具备相对论协变性的二阶方程;(2)电磁质量不满足相对论的质能关系 $U_0=mc^2$,出现一不正确的系数4/3;(3)电子具有一定半径 r_0 不是点电荷,而且把它当作刚体看待,也不符合相对论观点。在相对论和量子力学的讨论中将出现一系列的问题;现代基本粒子的量子理论都是建立在点电荷模型之上的。按此有限尺度的电子模型,电子半径 $\approx\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^2 m}\approx10^{-15}$ 米,然而现有实验表明,在直到 10^{-17} 米范围内电子仍然像是一个点粒子。若取 $r_0\to0$,则自能 U_0 或电磁质量 $m_{\text{e,m}}$ 都将成为无穷大,即是著名的发散困难;(4)按恩莎(Earnshaw)定理(参见“恩莎定理”),球体内的静电荷分布是不稳定的,除非存在某种非静电力见“庞加莱应力”。

阿布拉罕-洛伦兹运动方程 Abra-ham-Lorentz equation of motion 电荷 q 作加速运动时,由于电磁辐射将受到辐射阻尼力。计及辐射阻尼力后,荷电粒子的运动方程可写为:

$$m\dot{\boldsymbol{v}}-\frac{q^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3}\ddot{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{F}_{\text{ext}}$$

这个方程有时称为阿布拉罕-洛伦兹运动方程。式中 m 是粒子的经验质量(电磁质量与非电磁性质量之和);$\boldsymbol{F}_{\text{ext}}$ 是除电荷自场作用以外的其他外(场)力。

见“阿布拉罕-洛伦兹模型”

经典电子半径 classical electron radius 实验测量到的电子质量,是它的非电磁性的质量和电磁质量之和,这两种质量对电子惯性的效果完全一样,无法把它们分离开来,除非知道带电粒子内部的电荷分布状况。对电子来说,迄今还不知道它的结构。汤姆孙(Thomson),洛伦兹和阿布拉罕等人认为,电子不存在非电磁性的质量,全部质量由电磁质量构成,且假定电荷以半径为 r_0 的球对称分布。这样可估计电子质量的数量级为 $m=m_{\text{em}}=\dfrac{4U_0}{3c^2}\approx\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^2\boldsymbol{r}_0}$;电子半径的数量级则是 $\boldsymbol{r}_0=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 c^2 m}=2.82\times10^{-15}$ 米(在高斯单位制中 $\boldsymbol{r}_0=\dfrac{e^2}{mc^2}$),称为经典电子的半径。必须指出,这样得出的电子半径 $\boldsymbol{r}_0$ 本身并没有多大意义,且不说所作的假定没有实验依据,况且电子属于微观客体,经典理论是不可能正确描述的。然而,$\boldsymbol{r}_0$ 的表式却由电子的一些基本量构成,

具有长度量纲，因而人们常用它作为微观客体的长度单位，即使在近代量子理论的许多公式中也常出现。

见“电磁质量”。

电磁质量 electromagnetic mass　运动带电粒子周围的电磁场可分为辐射场和静电性场两类。辐射场可以脱离带电粒子而传播、辐射；静电性场则总是伴随着带电粒子，故称“自有场”。作匀速运动的带电粒子只存在自有场，但带电粒子的运动变化时，自有场也随之变化，场的能量和动量也同时变化。由于自有场包裹着带电粒子不能分离，因而施加外力作用时，就不仅仅改变带电粒子的动量、能量，也必须把自有场的动量、能量的改变包括进去；对于外力来说，好像粒子的惯性质量增大了，除了粒子本身的非电磁质量 m_0 外，还附加着电磁性的质量 m_{em}。这个附加的质量便称为带电粒子的“电磁质量”。实际上，电磁质量是当带电粒子的动量改变从而改变自有场时自有场的反作用结果。带电粒子的非电磁质量和电磁质量无法区分开来，实验测量到的总是这两者之和 $m = m_0 + m_{em}$。

如果带电粒子的运动速度比光速小得多，且电荷为球对称分布时，通过适当的计算可以证明，它的电磁质量可表示为 $m_{em} = \frac{4}{3}\frac{U_0}{c^2}$。式中 U_0 是粒子静止时的库仑场电能。要是不知道带电粒子内部的电荷分布，其电磁质量的确切数值也就无法得出。

见“运动带电粒子的电磁场”，“经典电子半径”。

庞加莱应力 Poincaré stresses　由于电荷自场应力的存在，按恩莎定理电荷是不可能稳定的；庞加莱（Poincaré）指出应当存在一非电磁性的应力以抵消电荷的自场应力，从而使电荷得以稳定。这种用来抵消排斥性电磁应力的吸引性非电磁应力，称为庞加莱应力。

谱线的自然宽度 natural frequency width of spectral line　按经典电动力学观点电磁波（光波）是由振动的荷电振子激发的，由于存在辐射场对电荷作用的自身力（辐射阻尼），振子振动将显衰减，因而辐射场将不是单一频率的电磁波（光波），而在固有频率附近存在一定频宽。这便是电磁波（光波）谱线的自然（频率）宽度。

考虑一束缚电子，其振动的固有频率为 ω_0，在受自身辐射阻尼力作用下的运动微分方程为

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{e^2 \dddot{x}}{6\pi\varepsilon_0 c^3 m}$$

可合理地近似为

$$\ddot{x} + \gamma\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$$

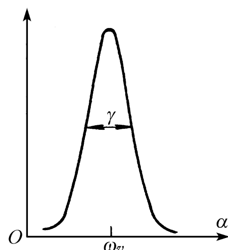
式中 $\gamma = \frac{e^2\omega_0^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3 m}$，为一很小的量。由此得电子的运动随时衰减的振动解：

$$x = Ae^{-\gamma t/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}。$$

故振子所辐射的电磁场（光波）也具有衰减因子 $\mathrm{e}^{-\gamma t/2}$；作傅里叶谱分析，给出谱线强度，

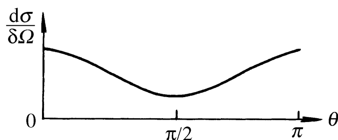
$$I_\omega = \frac{I_0\gamma}{2\pi}\frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2/4}$$

此为在电子固有频率 ω_0 附近具有频宽 $\Delta\omega \approx \gamma$ 的谱线。谱线的这一频宽并非外界影响所致，是自身必然存在的，故是谱线的自然宽度，虽然辐射阻尼不是影响频宽的惟一因素，原子间的碰撞以及多普勒（Doppler）等其他因素效应，也会对谱线的宽度有贡献。



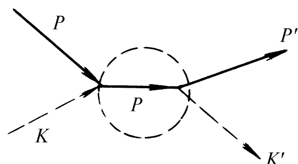
自由电子的散射 scattering by an individual free electron　自由电子散射又称汤姆孙散射，是指自由电子受到入射线偏振电磁波作用而受迫振动时，激发次级辐射场。每一电子的有效散射截面，即汤姆孙散射截面为，$\sigma_g = \frac{8\pi r_0^2}{3}$；微分散射截面 $\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{r_0^2(1+\cos^2\theta)}{2}$，这里 r_0 是经典电子半径；θ 是散射角。如图可见向前和向

后散射是对称的，这个结论与量子力学的结果比较，只是在入射波频率 $\omega\to 0$ 的极限下才符合。这里所示的经典结果，至少存在两个问题：微分截面与频率无关，显然与量子力学结果不同；其次，前后散射对称，则入射波必有动量传递给散射电荷，将导致散射电荷出现一定的速度，然而实验上测不出这样的速度。



汤姆孙散射 Thomson scattering 自由电子对于入射电磁波的散射，称汤姆孙散射。见“自由电子的散射”。

康普顿散射 Compton scattering 电磁波被静止自由电子散射，若入射波的频率较高，其能量可与电子的静止能相比时，$\hbar\omega\approx m_0c^2$，就需计及量子效应；光波显示粒子性被看作光子。如图，计及电子反冲作用的光子散射过程称为康普顿散射，它的散射截面需由量子电动力学计算。图中 $\boldsymbol{P}$，$\boldsymbol{K}$ 分别是散射前电子和入射光子的动量；$\boldsymbol{P}'$，$\boldsymbol{K}'$ 为散射后的动量；圆圈内代表中间状态（电子吸收光子后和发射光子前后动量为 $\boldsymbol{p}$）。电子的反冲对入射光散射的影响，首先是由康普顿从实验上观察到的。只是当入射光的频率很低，$\frac{\hbar\omega}{m_0c^2}\to 0$ 时光子动量可以忽略，散射截面方可由经典汤姆孙散射截面公式表示。见“自由电子的散射”。



散射截面 scattering cross section 电磁波通过媒质时受到媒质的散射，散射波的辐射能量，跟通过单位面积的入射电磁波能量的比值，反映媒质对电磁波的散射程度，称为媒质对电磁波的散射截面。

设以 x 方向偏振，沿 z 方向传播的入射平面电磁波，振幅矢量为 $E_0\boldsymbol{e}_x$；散射电磁波振幅矢量是 $E_0\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)$。在远离散射中心处的电磁波可表示为

$$\boldsymbol{E}=E_0\left[\boldsymbol{e}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\boldsymbol{e}_s\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{kr}\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right]$$

这里 $\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)$ 是散射函数。经过适当运算，媒质对入射电磁波的散射截面可表示为

$$\sigma_s=\frac{\text{散射波的辐射能量}}{\text{通过单位面积的入射波能量}}$$

$$=\frac{1}{k^2}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}|\boldsymbol{F}|^2\sin\theta\mathrm{d}\theta$$

见“微分散射截面”

微分散射截面 differential scattering cross section 电磁波通过媒质时受到媒质的散射。单位立体角内散射波的辐射能量跟通过单位面积的入射电磁波的能量的比值，反映媒质对电磁波散射程度的角分布，称为媒质对电磁波的微分散射截面。

设以 x 方向偏振，沿 z 方向传播的入射平面电磁波，振幅矢量为 $E_0\boldsymbol{e}_x$，散射电磁波的振幅矢量是 $E_0\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)$。在远离散射中心处的电磁波可表示为

$$\boldsymbol{E}=E_0\left[\boldsymbol{e}_x\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{1}{kr}\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}\right]$$

这里 $\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)$ 是散射函数。经过适当运算，媒质对入射电磁波的微分散射截面可表示为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_s}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{\text{单位立体角内散射波的辐射能量}}{\text{通过单位面积的入射波能量}}$$

$$=\frac{1}{k^2}|\boldsymbol{F}(\theta,\varphi)|^2$$

见“散射截面”。

辐射吸收 absorption of radiation 电磁波通过媒质时使媒质中的束缚电子发生强迫振动，从而一部分电磁波的能量转化为束缚电荷系的能量，这种能量的转移便是媒质对辐射（电磁波）的吸收。基本的理论模型如下：一束缚电子（电量 e，质量 m）受（角）频率 ω，在 x 方向偏振的平面电磁波电场作用时，运动微分方程为

$$\ddot{x}-\frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0c^3m}\dddot{x}+\omega_0^2x=E_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\quad(1)$$

上式左方第二项是束缚电子的辐射阻尼作用；ω_0 是束缚电荷的固有振动频率。注意到解的振动特性，可设

$$\ddot{x}=-\omega^2 x,\ \gamma=\frac{e^2\omega^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3 m} \qquad (2)$$

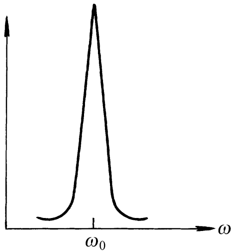
则电荷运动的稳态解为

$$x=\frac{e}{m}\left(\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-\mathrm{i}\omega\gamma}\right)E_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \qquad (3)$$

如果电磁波包含有各种频率，则媒质吸收的能量为

$$\Delta U=\int_{-\infty}^{\infty}eE(t)\dot{x}(t)\mathrm{d}t=\frac{2\pi e^2}{m}\times\int_0^{\infty}|E_\infty|^2\frac{2\omega^2\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)^2-\omega_0^2\gamma^2}\mathrm{d}\omega$$

被积函数在 $\omega=\omega_0$ 处有一尖锐的峰，表明在频率 $\omega=\omega_0$ 处出现强烈吸收；并在 ω_0 附近出现一定宽度的吸收带（见图）。

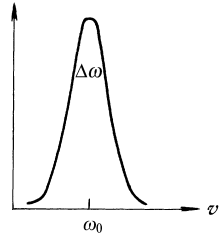


电磁波的吸收带　absorption band of electromagnetic waves　媒质对频率在媒质的特征频率 ω_0 附近，一定频率宽度 $\Delta\omega$ 范围内的入射电磁波，具有明显的吸收现象。这一频率宽度 $\Delta\omega$ 称为媒质对电磁波（光波）的吸收带。以稀薄电子气为例，它的色散关系近似为

$$\boldsymbol{n}\approx 1+\frac{Ne^2}{2\varepsilon_0 m}\frac{\omega_0^2-\omega^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}+\mathrm{i}\frac{Ne^2}{2\varepsilon_0 m}\frac{\omega\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}$$

折射率的虚部反映介质对电磁波的吸收，其曲线在 $\omega=\omega_0$ 附近存在一定频宽的峰即吸收峰，如图所示。

见“辐射吸收”，“稀薄电子气的色散公式”。



吸收截面　cross section for absorption　电磁波通过媒质时，由于媒质的导电等原因损耗能量。电磁波损耗的能量跟通过单位面积的入射电磁波的能量的比值，反映媒质对电磁波的吸收程度，称为媒质对电磁波的吸收截面。

设入射电磁波的振幅为 E_0，媒质的电导率是 σ，媒质内的电场强度为 $\boldsymbol{E}$，则仅计及媒质的焦耳损耗时，吸收截面为

$$\sigma_{\mathscr{A}}=\frac{\text{损耗的电磁波能量}}{\text{通过单位面积的入射波能量}}=\sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}}\frac{1}{E_0^2}\int\sigma|\boldsymbol{E}|^2\mathrm{d}v$$

稀薄电子气的色散公式　dispersion formula for a dilute gas of electrons　电磁波通过媒质时，使媒质中的束缚电荷发生强迫振动激发次级电磁波，导致对入射电磁波的散射和吸收。由于次级电磁波影响了电磁波在媒质中的速度，表现为对媒质折射率的影响，并与入射波的频率有关。折射率与入射波的频率相关的公式，称为色散公式，稀薄电子气的色散公式为

$$n^2=1+\frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m}\frac{1}{\omega_0^2-\omega^2-i\omega\gamma}$$

或近似为

$$n\approx 1+\frac{Ne^2}{2\varepsilon_0 m}\frac{\omega_0^2-\omega^2}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}+\mathrm{i}\frac{Ne^2}{2\varepsilon_0 m}\frac{\omega\gamma}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\omega^2\gamma^2}$$

式中 N 是单位体积内电子的数目，$\gamma=\frac{e^2\omega^2}{6\pi\varepsilon_0 c^3 m}$ 是与辐射阻尼相关的常数。折射率的虚部反映电子气对电磁波的吸收。

见“辐射吸收”，“辐射反作用”。

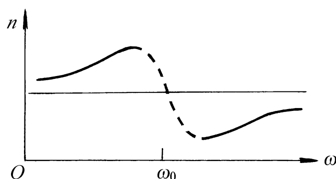
正常色散和反常色散　normal and anomalous dispersion　媒质的折射率与电磁波（光波）的

频率相关，是为色散现象。折射率随频率增大而增大，称为正常色散；随频率增大而减小，则是反常色散。以稀薄电子气为例，折射率（实部）与频率的关系为

$$n \approx 1 + \frac{Ne^2}{2\varepsilon_0 m}\,\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2\gamma^2}$$

如下图所示，在离 ω_0 较远的频率处，呈正常色散（n 以实线表示）；靠近 ω_0 处是反常色散（n 以虚线表示）。

见“稀薄电子气的色散公式”。



反常色散 anomalous dispersion 见“正常色散和反常色散”

色散关系 dispersion relation 电磁波（光波）通过媒质时，折射率和吸收率分别与媒质介电常数 $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ 的实部 ε_1 和虚部 ε_2 直接相关，且与电磁波的频率有关，作为电磁波频率 ω 的函数，媒质介电常数的实部和虚部之间的普遍关系，称为介电函数的“色散关系”。采用傅里叶分析方法导出色散关系为

$$\varepsilon_1(\omega) - \varepsilon_0 = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \frac{\omega'\varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}\mathrm{d}\omega';$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi}\int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega') - \varepsilon_0}{\omega'^2 - \omega^2}\mathrm{d}\omega'$$

这关系是克拉默斯（Kramers）于1927年首先从经典理论导出的，故又称经典克拉默斯关系，以区别从量子力学导出的色散关系。

库仑碰撞时的能量转移 energy transfer in Coulomb collision 两自由电荷的碰撞，是为库仑碰撞，在碰撞过程中，将出现动量和能量的转移。对于速度（能量）不是很大的非相对论性粒子，可忽略由于粒子加速而导致的辐射能量损失，但对极端的相对论性粒子，辐射（能量）损失就可能是主要的。

此外，有些碰撞还可能伴随荷电粒子的产生和湮灭过程，当然这纯属量子力学效应。

见“快速带电粒子与束缚电荷碰撞时的碰撞能量转移”，“相对论性电荷的辐射能量损失公式”。

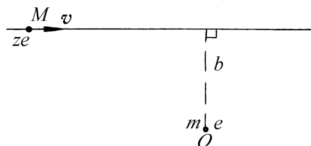
库仑碰撞中的碰撞能量转移 collision energy transfer in a coulomb collision 如图，一质量 M 电荷 ze 能量为 $U = \gamma Mc^2$（注意 $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$）的粒子以速度 $\boldsymbol{v}$ 在原子近旁通过与原子中的一个电子发生碰撞，碰撞参数为 b。对入射粒子的质量比电子质量大很多（$M \gg m$）和粒子的运动比电子的轨道运动快得多，原子中的电子可看做自由电子，粒子的动量转移很少时，基本上仍保持直线运动，经过适当运算可得近似的能量转移公式为

$$\Delta U(b) = \frac{z^2e^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2 mv^2}\left(\frac{1}{b^2}\right)$$

另一方面，对于弹性碰撞，由动量和能量守恒，在 $M \gg m$ 条件下，正碰时转移能量最大，为 $\Delta U_{\max} = 2m\gamma^2 v^2$，则由 $\Delta U(b_{\min}) = \Delta U_{\max}$ 可定义低限碰撞参数：$b_{\min} = \dfrac{ze^2}{4\pi\varepsilon_0\gamma mv^2}$。$b$ 低于此数时，则由更正确些的公式

$$\Delta U(b) = \frac{z^2e^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2 mv^2}\left(\frac{1}{b_{\min} + b^2}\right)$$

来表示粒子对电子的能量转移。



与束缚电荷碰撞时的碰撞能量转移 collision energy transfer in collision with bound charges 如图，质量 M 带有电荷 ze 的粒子以速度 v 沿单位矢 $\boldsymbol{i}$ 方向在原子中的束缚电子附近快速通过，将向束缚电子转移能量；质量为 m，电荷为 e 的束缚电子振子的固有圆频率为 ω_0。在粒子 M 的电场作用下，运动方程为

$$\ddot{\boldsymbol{r}} + \Gamma\dot{\boldsymbol{r}} + \omega_0^2\boldsymbol{r} = \frac{e}{m}\boldsymbol{E}(t)$$

式中 Γ 为一微小的阻尼常数；

$$E(t) = \frac{\gamma ze(b\boldsymbol{k} - vt\boldsymbol{i})}{4\pi\varepsilon_0(b^2 + \gamma^2v^2t^2)^{3/2}}$$

（见“运动带电粒子的电磁场”），$\gamma=\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$。运动粒子对束缚电荷的能量转移为

$$\Delta U=e\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}\mathrm{d}t=\frac{z^2e^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2mv^2}\left(\frac{1}{b^2}\right)\times\left[\xi^2\mathrm{K}_1^2(\xi)+\frac{1}{\gamma^2}\mathrm{K}_0^2(\xi)\right]$$

这里 $\xi=\frac{\omega_0 b}{\gamma v}$；$\mathrm{K}_0(x)$，$\mathrm{K}_1(x)$ 分别是第二类零阶和一阶的变型贝塞尔（Bessel）函数。定义最大碰撞参数 $b_{\max}=\frac{\gamma v}{\omega_0}$，则 $\xi=b/b_{\max}$ 在碰撞参数很小 $\xi\ll1(b\ll b_{\max})$ 和很大 $\xi\gg1(b\gg b_{\max})$ 的极限条件下的能量转移为

$$\Delta U=\frac{z^2e^4}{8\pi^2\varepsilon_0^2mv^2}\left(\frac{1}{b^2}\right)\times\begin{cases}1 & \xi\ll1\\(1+1/\gamma^2)\frac{\pi}{2}\xi e^{-2\xi} & \xi\gg1\end{cases}$$

快速重粒子穿过物质的碰撞能量损失公式 collision Energy-loss formulas for a fast, heavy particle passing through matter 碰撞能量损失公式用来计算重粒子穿过物质时，粒子经由与其他粒子碰撞，在单位距离内被转移的能量。

设粒子的电荷为 q，在物质中以速度 v 运动；单位体积物质内具有 N 个原子，每一原子上有 Z 个电子。按束缚振子的固有频率分类，每一原子中固有频率为 ω_1 的电子数为 f_i，即 $\sum_i f_i=Z$。则得单位距离内经典能量损失公式

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}=NZ\frac{q^2e^2}{\varepsilon_0mv^2}\left[\ln B_c-\frac{v^2}{2c^2}\right]$$

此式由玻尔（Bohr）于1915年导出，式中 $B_c=\frac{1.123\gamma v}{\langle\omega\rangle b_{\min}}$，平均频率 $\langle\omega\rangle$ 定义为 $Z\ln\langle\omega\rangle=\sum_i f_i\ln\omega_i$。

玻尔的经典能量损失公式对于较慢的α粒子和较重的核子，符合条件 $\frac{qe}{\hbar v}>1$，给出的结果是合理的，但对电子，介子，质子以至快速α粒子，则过高估计了能量损失，对这些较轻的粒子，必须作量子力学修正。1930年，贝瑟（Bethe）给出了一个量子力学的能量损失公式

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}=NZ\frac{q^2e^2}{\varepsilon_0mv^2}\times\left[\ln\left(\frac{2\gamma^2mv^2}{\hbar\langle\omega\rangle}\right)-\frac{v^2}{c^2}\right]$$

只要粒子的能量不是非常大（$v\to c$；$\gamma\gg1$）的极端相对论性粒子。这个公式能较好地应用于计算 $\frac{qe}{\hbar v}<1$ 条件下所有快粒子的能量损失。但对极端的相对论性粒子，需要计入原子的极化效应。见“碰撞能量损失的密度效应”。

碰撞能量损失的密度效应 density effect in collision energy loss 对于能量很高的极端相对论性粒子（$v\to c$；$\gamma\gg1$），通过物质时的能量损失比上一词条表出公式的结果为小，特别在高密度物质中能量损失的减少更显著。这便是能量损失的密度效应。

对于极端高速粒子，或在高密度物质中，在给定的碰撞参数 b 范围内，存在多个原子，这些原子的极化将影响粒子的场，从而减少能量转移。1940年，费米（Fermi）给出计及密度效应的能量损失公式

$$\left(\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}x}\right)_{b>a}=\frac{1}{2\pi\varepsilon_0}\frac{q^2}{v}\mathrm{Re}\int_a^{\infty}i\omega\lambda^*a\mathrm{K}_1\cdot(\lambda^*a)\cdot\mathrm{K}_0(\lambda a)\left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon(\omega)}-\beta^2\right)\mathrm{d}\omega$$

式中 a 是与原子尺度同量级的长度，$\lambda=\frac{\omega}{v}\sqrt{1-\beta^2\frac{\varepsilon(\omega)}{\varepsilon_0}}$，$\lambda^*$ 是 λ 的复共轭，$\beta=v/c$，$\varepsilon(\omega)$ 是介电函数，$\mathrm{K}_0(x)$，$\mathrm{K}_0(x)$ 分别为零阶和一阶的第二类变型贝塞尔函数。可以证明，当 $\beta=v/c\ll1$ 时费米公式与玻尔公式一致。见“参速重粒子穿过物质的碰撞能量损失”。

碰撞能量损失的极化效应 Polarization effects in collision energy loss 见“碰撞能量损失的密度效应”

振子强度 oscillator strength 原子的束缚电子在迅变的外电场作用下将作受迫振动，但由于原子核对各电子的束缚程度不同，因而具有不同的谐振频率。如果将束缚 电子按不同的谐振频率分类，设频率为 ω_i 的电子数为 f_i，则对于原子序数为 Z 的原子有 $Z=\sum_i f_i$。这里定义的数 f_i 称为第 i 种振子的振子强度。

相对论性荷电粒子的辐射能量损失公式 energy loss formulas for charged ultrarelativistic particles 荷电粒子在碰撞过程中将出现能量的转移(损失),包含碰撞能量损失和辐射能量损失。对于非相对论性粒子,辐射能量损失并不重要,常可略去不计。但对于极端的相对论性粒子,辐射能量损失则是主要的。

对于质量为 M,电荷 q 的相对论性粒子与固定电荷 Q 碰撞时,单位距离内辐射损失的能量为

$$\frac{\mathrm{d}U_r}{\mathrm{d}x} \approx \frac{4NQ^2}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2 \ln(\lambda\gamma)\gamma Mc^2$$

式中 N 是粒子行进单位距离遇到的固定电荷数目;λ 是量级为 1 的常数;

$$\gamma = 1 \quad \sqrt{1 - v^2/c^2}。$$

若固定电荷是原子核,核电荷为 Ze,质量 M',则还需计及原子中电子对核的屏蔽作用,粒子的辐射能量损失公式修正为

$$\frac{\mathrm{d}U_r}{\mathrm{d}x} \cong \left[\frac{4NZ^2e^2}{3\pi\varepsilon_0\hbar c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2 \times \ln\left(\frac{\lambda 192 M}{Z^{1/3}M'}\right)\right]\gamma Mc^2$$

正比于粒子的能量。

辐射截面 radiation cross section 定义荷电粒子碰撞辐射时的辐射截面:$\chi(\omega) = \int I(\omega, b)2\pi b\mathrm{d}b$,它的量纲是“面积·能量/频率”。式中 b 是碰撞参数,$I(\omega, b)$ 为粒子的辐射频谱。

例如讨论一质量 M 电荷 q 的非相对论性粒子以速度 v 在电荷为 Q 的固定粒子近旁通过时的辐射截面。粒子受 Q 的库仑电场作用而改变运动方向,若方向偏离很小,速度的改变主要是横向的,改变量为 $\Delta v = \dfrac{qQ}{2\pi\varepsilon_0 Mvb}$;辐射频谱为

$$I(\omega, b) = \begin{cases} \dfrac{q^2}{6\pi^2\varepsilon_0 c}\left|\dfrac{\Delta \boldsymbol{v}}{c}\right|^2 = \dfrac{2q^4Q^2}{3\pi^2\varepsilon_0 Mc^3v^2b^2} & \omega < \dfrac{v}{b} \\ 0 & \omega > \dfrac{v}{b} \end{cases}$$

又,经典最小碰撞参数 $b_{\min} = \dfrac{qQ}{4\pi\varepsilon_0 Mv^2}$。由此非相对论性入射粒子的经典辐射截面为

$$\chi_c(\omega) = \int_{b_{\min}}^{\infty} I(\omega, b)2\pi b\mathrm{d}b \cong \frac{4Q^2}{3\pi\varepsilon_0 c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2\left(\frac{c}{v}\right)^2 \cdot \ln\left(\frac{4\pi\varepsilon_0\lambda Mv^2}{qQ\omega}\right)$$

适用于电荷大的“慢速”重粒子。式中 λ 是单位量级的数值因子。

对于电荷小的快速粒子,需要考虑粒子的波动性,从而得出半经典的量子力学辐射截面公式

$$\chi_{cq}(\omega) = \frac{4Q^2}{3\pi\varepsilon_0 c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2\left(\frac{c}{v}\right)^2 \ln\left(\frac{\lambda Mv^2}{\hbar\omega}\right)$$

这个式子仅适用于粒子辐射谱中频率较低的软光子,因为没有计及发射光子(辐射电磁波)的量子特性。对于频谱高端的硬光子,辐射截面公式则为

$$\chi_q(\omega) = \frac{4Q^2}{3\pi\varepsilon_0 c}\left(\frac{q^3}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2\left(\frac{c}{v}\right)^2 \cdot \ln\left(\frac{\lambda}{2}\frac{\left(\sqrt{T} + \sqrt{T - \hbar\omega}\right)^2}{\hbar\omega}\right)$$

式中 $T = mv^2/2$ 是粒子的初始动能。若取 $\lambda = 2$,上式即是玻恩近似下的贝特–海特勒(Bethe-Heitler)公式。

对于极端高速的相对论性粒子,总辐射截面公式为

$$\chi_r(\omega) = \frac{4Q^2}{3\pi\varepsilon_0 c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2\left(\frac{c}{v}\right)^2 \times \left[\ln\left(\frac{2\lambda Mv^2}{\hbar\omega} - \frac{13}{12}\right)\right]$$

式中 $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$。

粒子与原子碰撞时,若再计及原子中的电子对核电荷的屏蔽作用,则荷电相对论粒子的辐射截面为

$$\chi_r(\omega) = \frac{4Z^2e^2}{3\pi\varepsilon_0 c}\left(\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 Mc^2}\right)^2\left(\frac{c}{v}\right)^2 \times \left[\ln\left(\lambda\frac{192Mv}{Z^{1/3}M'c}\right)\right]$$

这里已取核电荷 $Q = Ze$,原子质量为 M'。

辐射长度 radiation length 荷电的运动粒子由于辐射在运动过程中损失能量；粒子的能量随距离而减少。能量减少至原有能量的 e^{-1} 时，粒子运动过的距离称为辐射长度。设沿 x 方向运动的荷电粒子，初始能量为 U_0，以 l_0 表示辐射长度，则粒子能量随距离的关系是 $U=U_0\exp\cdot\left(-\frac{x}{l_0}\right)$。对于电子，$l_0$ 的典型数据为：空气中 270 米；铝中 7.2 厘米；铅中 0.39 厘米。

韦查科-威廉姆斯的虚光子方法 Weizsäker-Williams method of virtual photon 以接近光速运动的高速运动荷电粒子，在某一目标体，如游离的原子、核子等附近掠过时，与目标体之间的电磁互作用可看成高速粒子激发的脉冲辐射电磁场与目标体场的互作用，脉冲电磁场可按傅里叶（Fourier）级数展开成单色平面电磁波的叠加，这些不同频率的单色平面电磁波，分别是不同能量的光子（参见“哈密顿函数的平面波表示”，“量子电动力学”），从而荷电粒子对于目标体的作用，代之为虚光子的相关互作用，以计算虚光子关于目标体的散射或吸收。这个方法是 C.F. Weizsäker 和 E.J. Williams 于 1934 年各自独立发展起来的，称 Weizsäker-Williams 虚光子方法。

电子俘获 electron capture 电子俘获过程是，围绕一不稳定原子核的轨道电子可被原子核俘获，使原子序数为 Z 的原子转换成原子序数为 $Z-1$ 的另一原子，同时放出一中微子。这个过程的符号表示为

$$Z+e^{-}=(Z-1)+v$$

伴随轨道电子俘获的辐射光子谱中，包含有电荷消失（电子圆轨道消失）的光子谱和电子磁矩消失的光子谱。这些光子谱对于了解此过程中能量的释放信息是很重要的。

七、电磁场的相对论表示

Special Theory of Relativity for Electrodynamics

原电荷密度 proper charge density 在相对于电荷体系为静止的惯性参照系中观察到的电荷密度，称为狭义相对论的原电荷密度。设原电荷密度为 ρ_0，则相对于参照系以速率 u 运动的电荷系，电荷密度为

$$\rho=\frac{\rho_0}{\sqrt{1-u^2/c^2}}。$$

四维电流密度矢量 four-vector of current density 狭义相对论表明，三维电流密度矢量 $\boldsymbol{J}$ 和电荷密度 ρ 可合成为洛伦兹协变的四维电流密度矢量：$j_\mu=(\boldsymbol{J},\mathrm{i}c\rho)$。

诱导电流密度四维矢量 four-vector of induction current density 跟自由电流和自由电荷类似，介质中的诱导电流（磁化电流和极化流）密度 $\boldsymbol{J}_M=\boldsymbol{J}_m+\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial t}$，跟极化电荷密度 $\rho_p=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}$ 也可构成洛伦兹四维协变矢量，称为诱导电流密度四维矢量 $j_\mu=(\boldsymbol{J}_M, ic\rho_p)$。

诱导电流密度四维矢量与四维矩张量 $M_{\mu v}$ 之间的关系是 $j_\mu=\frac{\partial M_{\mu v}}{\partial x_v}$。按惯例，对同一项中出现的重复足码 μ 由 1 至 4 求和。

见“四维电流密度矢量”，“矩张量”。

四维矢量势 four-vector potential 狭义相对论理论表明，电磁场的矢量势和标量势可构成洛伦兹协变的电磁场四维矢量势：$A_\mu=\left(\boldsymbol{A},\frac{i}{c}\phi\right)$。这表明 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 是同一物理量的两个方面，只是在不同惯性系中表现的程度不同。

洛伦兹力密度四维矢量 four-vector of Lorentz force density 作用于运动电荷的洛伦兹力密度矢量和功率密度构成如下洛伦兹协变的四维矢量：

$$\boldsymbol{f}_\mu=\rho\left[(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B}),\frac{i}{c}\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{u}\right]$$

式中 ρ 是电荷密度，$\boldsymbol{u}$ 为电荷的运动速度。

电荷守恒定律的协变表述 covariant formulation of the charge conservation 狭义相对论表明，电荷守恒定律 $\nabla\cdot\boldsymbol{J}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$，可表示为四维协变方程：$\frac{\partial j_\mu}{\partial x_\mu}=0$。在不同惯性系间作洛伦兹变换时，此方程的形式不变，故是电荷守恒定律的协变表述。这里 $j_\mu=(\boldsymbol{J},\mathrm{i}c\rho)$，$x_\mu=(\boldsymbol{r}, ict)$

分别是闵可夫斯基空间(Minkowski space)四维电流密度矢量和四维坐标矢量;对方程同一项中重复的希腊字母足码 μ,由1～4求和。

麦克斯韦方程组的协变表述 covariant formulation of Maxwell equations 真空中的麦克斯韦方程组可用电磁场四维张量 $F_{\mu\nu}$表示成关于洛伦兹变换的协变表式。即在洛伦兹变换下,方程的形式保持不变:

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}=0$$

对应于方程

$$\begin{cases}\nabla\cdot\boldsymbol{E}=\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \nabla\times\boldsymbol{B}=\varepsilon_0\mu_0\dfrac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial\boldsymbol{t}}+\mu_0\boldsymbol{j};\end{cases}$$

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial x_\lambda}+\frac{\partial F_{\nu\lambda}}{\partial x_\mu}+\frac{\partial F_{\lambda\mu}}{\partial x_v}=0$$

对应于方程

$$\begin{cases}\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0\\ \nabla\cdot\boldsymbol{E}=-\dfrac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}\end{cases}$$

按惯例,对式中同一项中出现的重复足码由1～4求和,$x_\mu=(\boldsymbol{r},ict)$是四维坐标矢量。

介质中的麦克斯韦方程组也可表示为四维协变的形式,参见“介质中麦克斯韦方程组的协变式”。

见“电磁场张量”。

介质中麦克斯韦方程组的协变表述 covariant formulation of Maxwell equations in media 引入由磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 和位移矢量 $\boldsymbol{D}$ 构成四维的二阶协变张量 $H_{\mu\nu}$,用矩阵表示为

$$H_{\mu\nu}=\begin{bmatrix}0 & H_z & -H_y & -icD_x\\ -H_z & 0 & H_x & -icD_y\\ H_y & -H_x & 0 & -icD_z\\ icD_x & icD_y & icD_z & 0\end{bmatrix}$$

它与电磁场张量 $F_{\mu\nu}$和矩张量 $M_{\mu\nu}$间的关系为

$$H_{\mu\nu}=\frac{1}{\mu_0}F_{\mu\nu}-M_{\mu\nu}$$

这样,介质中的麦克斯韦方程组关于洛伦兹变换的协变表述是

$$\frac{\partial H_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}=\boldsymbol{j}_\mu$$

对应于方程组

$$\begin{cases}\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{J}_{\mathrm{f}}+\dfrac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial\boldsymbol{t}}\\ \nabla\cdot\boldsymbol{D}=\dfrac{\rho_{\mathrm{f}}}{\varepsilon_0}\end{cases}$$

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial x_\lambda}+\frac{\partial F_{\nu\lambda}}{\partial x_\mu}+\frac{\partial F_{\lambda\mu}}{\partial x_v}=0$$

对应于方程

$$\begin{cases}\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0\\ \nabla\times\boldsymbol{E}=-\dfrac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial\boldsymbol{t}}\end{cases}$$

按惯例,对同一项中出现的重复足码由1～4求和。

见“电磁场张量”,“矩张量”,“电流密度四维矢量”。

洛伦兹条件的协变表述 covariant formulation of Lorentz condition 根据狭义相对论的理论,洛伦兹条件$\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\phi}{\partial\boldsymbol{t}}=0$,可表示为关于洛伦兹变换的协变形式$\dfrac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu}=0$。式中 $A_\mu=\left(\boldsymbol{A},\dfrac{i}{c}\phi\right)$,$x_\mu=(\boldsymbol{r},ict)$分别是矢量势、标量势和时、空坐标的四维协变矢量;按惯例对重复的足码由1～4求和。

见“洛伦兹条件”,“四维矢量势”。

电磁场张量 electromagnetic field tensor 根据狭义相对论的理论,电磁场的表式 $\boldsymbol{E}=-\nabla\phi-\dfrac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\boldsymbol{t}}$,$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$ 可统一由一个反对称四维张量 $F_{\mu\nu}=\dfrac{\partial\boldsymbol{A}_\nu}{\partial x_\mu}-\dfrac{\partial\boldsymbol{A}_\mu}{\partial x_\nu}$来表示,称为四维电磁场张量。这个张量的各分量与电磁场强的关系为

$$\boldsymbol{F}_{\mu\nu}=\begin{bmatrix}0 & B_z & -B_y & -\dfrac{i}{c}E_x\\ -B_z & 0 & B_x & -\dfrac{i}{c}E_y\\ B_y & -B_x & 0 & -\dfrac{i}{c}E_z\\ \dfrac{i}{c}E_z & \dfrac{i}{c}E_y & \dfrac{i}{c}E_z & 0\end{bmatrix}$$

它在洛伦兹变换下是协变的,表明电场和磁场是同一物理实在的两种表现形式,只是在不同的惯性系中表现的程度不同。

矩张量 moment tensor 介质中的磁化矢量和电极化矢量可以构成反对称四维二级张量

$$M_{\mu\nu}=\begin{bmatrix} 0 & M_z & -M_y & icP_x \\ -M_z & 0 & M_x & icP_y \\ M_y & -M_x & 0 & icP_z \\ -icP_x & -icP_y & -icP_z & 0 \end{bmatrix}$$

称为矩张量。它与介质中诱导电流密度四维矢量的协变关系是 $\boldsymbol{j}_\mu=\frac{\partial M_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}$。按惯例,需对式中同一项中出现的重复足码由 1～4 求和。

见“诱导电流密度四维矢量”

能量、动量平衡方程的协变表述 covariant formulation of energy balance and momentum balance equations 真空中电磁场的动量平衡方程

$$\nabla\cdot\Phi-\varepsilon_0\frac{\partial}{\partial t}(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})=\rho(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{B})$$

真空中电磁场的能量平衡方程

$$\frac{1}{\mu_0}\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B})+\rho\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{u}+\varepsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{E^2+c^2B^2}{2}\right)=0$$

由电磁场的四维能量-动量张量,统一表示为

$$\frac{\partial T_{\mu\nu}}{\partial x_\nu}=-f_\mu。$$

这便是电磁场能量、动量洛伦兹变换的协变表式。这里 $\boldsymbol{x}_\mu$ 和 f_μ 分别是协变的四维坐标矢量和四维洛伦兹力密度矢量。按惯例,对方程同一项中出现的重复足码由 1～4 求和。

见“动量平衡方程”,“能量平衡方程”,“电磁场能量-动量张量”。

电磁场的哈密顿量密度 Hamiltonian density of electromagnetic field 电磁场的拉格朗日量密度是 $\mathscr{L}=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{E^2}{c^2}-B^2\right)$。

从三维角度来看,广义坐标 ξ_t 和相应的共轭广义动量 π_i 为

$$\xi_j=A_j;\pi_j=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\xi_j}=-\varepsilon_0E_j,\qquad(j=x,y,z)$$

注意,$\boldsymbol{E}=-\nabla\phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$;$\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$。则无源电磁场的哈密顿量密度为

$$\mathscr{H}=\pi_i\xi_i-\mathscr{L}=\pi\cdot\left(\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right)-\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0E^2-\frac{1}{\mu_0}B^2\right)$$

$$=\frac{\pi^2}{2\varepsilon_0}+\frac{(\nabla\times\xi)^2}{2\mu_0}-(\pi\cdot\nabla\phi)$$

$$=\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0E^2+\frac{1}{\mu_0}B^2\right)-(\pi\cdot\nabla\phi)\qquad(1)$$

只要适当选取规范,上式最后一项可取为 0。注意

$$\pi\cdot\nabla\phi=-\varepsilon_0\boldsymbol{E}\cdot\nabla\phi=-\varepsilon_0\nabla\cdot(\boldsymbol{E}\phi)+\varepsilon_0\phi\nabla\cdot\boldsymbol{E},\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0$$

及在无穷远处 $\boldsymbol{E}\rightarrow0$,因而式(1)最后一项的体积分总是等于 0:$-\int\pi\cdot\nabla\phi\mathrm{d}V=\varepsilon_0\oiint E\phi\mathrm{d}s-\varepsilon_0\int(\nabla\cdot\boldsymbol{E})\phi\mathrm{d}V=0$。

见“电磁场的拉格朗日量密度”,“电磁场的正则共轭变量”。

电磁场的拉格朗日量密度 Lagrangian density of electromagnetic field 由于空间每一点处的电磁场量都是独立可变的,因而电磁场是具有无限多个自由度的连续统。它的拉格朗日(Lagrange)函数可表示为对空间的积分 $L=\int\mathscr{L}\mathrm{d}v$,式中单位体积内的拉格朗日量(Lagrangian)$\mathscr{L}$称为电磁场的拉格朗日量密度,或拉格朗日函数密度,它与电磁场张量或电磁场的关系如下:

(1) 没有电荷电流分布的无源情形:

$$\mathscr{L}=-\frac{1}{4\mu_0}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{E^2}{c^2}-B^2\right)。$$

(2) 具有电荷电流分布的有源情形:

$$\mathscr{L}=-\frac{1}{4\mu_0}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}+j_\mu A_\mu$$

$$=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{E^2}{c^2}-B^2\right)-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{J}+\rho\phi。$$

空间各点四矢量势的各分量 $A_\mu(\boldsymbol{r},t)(\mu=1,2,3,4)$ 便是此连续统的广义坐标。

见“电磁场张量”,“四矢量势”,“四矢量电流密度”。

电磁场的正则共轭变量 canonical conjugate variables of electro-magnetic field 电磁场是连续统,空间每一点场量分别都是独立可变的,因而具有无限多个自由度。电磁场中每一点处的矢量势 $A_i(\boldsymbol{r},t)(i=x,y,z)$ 和标量势 ϕ 都作为广义坐标。相应的广义动量,则由电磁场的拉格朗日量密度按定义为

$$\pi_\mu=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\boldsymbol{A}_\mu}=\partial\mathscr{L}\Big/\partial\left(\frac{\partial A_\mu}{\partial t}\right),\mu=1,2,3,4$$

式中 $A_\mu=\left(\boldsymbol{A},\frac{i}{c}\phi\right)$ 为电磁场的四矢量势。广

义坐标 $\xi_\mu = A_\mu$ 和相应的广义动量 π_μ 称为电磁场的正则共轭变量。

从三维角度来看，共轭变量为

$$\left.\begin{aligned}\xi_j &= A_j \\ \pi_j &= \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \xi_j} = -\varepsilon_0 E_j\end{aligned}\right\} \quad (j = x, y, z)$$

见“电磁场的拉格朗日量密度”

哈密顿函数的平面波表示 plane wave representation of Hamiltonian 电磁场的广义坐标——矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和与其共轭的广义动量 π 的平面波表示(空间傅里叶级数展开)为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) = \sqrt{\mu_0/V}\sum_{k,j}\varepsilon_{kj}q_{kj}(t)e^{ki};$$

$$\pi(\boldsymbol{r}, t) = \sqrt{\varepsilon_0/V}\sum_{k,j}\varepsilon_{kj}p_{kj}(t)e^{ki}。$$

式中 ε_{kj} 是偏振方向的单位矢量，三个偏振方向是：$j = x, y, z$。取横波条件(库仑规范)，$\phi = 0$，$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$，则自由空间电磁场哈密顿函数的平面波表示为

$$H = \int\left[\frac{1}{2}\left(\varepsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0}B^2\right)\right]\mathrm{d}v$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{kj}(|p_{kj}|^2 + k^2|q_{kj}|^2)。$$

类似于“独立简谐振子系统”的哈密顿函数。每一个谐振子与相应的单色平面波电磁场模式对应。这种表示很容易进行量子化处理。量子化后，场的每一简谐振模式对应于一定能量的光子。

见“电磁场的正则共轭变量”，“电磁场的哈密顿量密度”。

麦克斯韦方程组的变分原理 variational principle for Maxwell equations 电磁场作为无限多自由度的连续统，引入适当的拉格朗日函数 L，则电磁场的运动方程——麦克斯韦方程组可由如下的变分原理得出

$$\delta\int L\mathrm{d}t = \delta\iint\mathscr{L}\mathrm{d}v\mathrm{d}t = 0 \qquad (1)$$

式中 L 为电磁场的拉格朗日函数；$\mathscr{L} = \mathscr{L}\left(\xi, \frac{\partial\xi}{\partial x_\mu}, t\right)$ 是拉格朗日量密度，ξ 是广义坐标，对应于四矢量势：$\xi \to A_\mu$。

由式(1)得

$$\int\left\{\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\xi} - \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\xi/\partial x_\mu)}\right]\right\}\delta\xi\mathrm{d}v\mathrm{d}t = 0$$

相应的拉格朗日–欧勒方程为

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\xi} - \frac{\partial}{\partial x_\mu}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\xi/\partial x_\mu)}\right] = 0$$

将电磁场的拉格朗日量密度代入即可得出麦克斯韦方程组。

见“电磁场的拉格朗日量密度”，“四维矢量势”，以及，理论力学部分：“哈密顿原理”。

运动荷电粒子的拉格朗日函数 Lagrange function of a moving charged particle 设运动粒子的电荷为 q，速度是 v；电磁场的矢量势和标量势分别为 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ。则荷电粒子在电磁场中运动时的拉格朗日函数为

非相对论情形：

$$L = T - V = \frac{1}{2}m_0 v^2 - q(\phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A})$$

相对论情形：

$$\begin{aligned}L &= T - V \\ &= -m_0 c^2\sqrt{1 - v^2/c^2} \\ &\quad - q(\phi - \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

这里 m_0 是静止质量。

电磁场中运动电荷的哈密顿函数 Hamiltonian of a moving charge in field 设运动电荷的电量为 q，速度是 $\boldsymbol{v}$；$\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 分别是电磁场的矢量势和标量势，则运动电荷的哈密顿函数为

非相对论情形：

$$H = \boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{v} - L = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A})^2 + q\phi$$

相对论情形：

$$H = c\sqrt{(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A})^2 + m_0^2 c^2} + q\phi$$

上列各式中 $\boldsymbol{P}$ 为运动粒子的正则动量；按定义，它的分量是 $P_i = \frac{\partial L}{\partial v_i}$，正则动量跟粒子动量 $\boldsymbol{p}$ 之间存在关系：$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p} + q\boldsymbol{A}$。

达尔文–布雷特互作用 Darwin-Breit interaction 电荷 q_1 和 q_2 分别以速度 υ_1，υ_2 运动，计及电磁场传播速度的有限性(推迟效应)，在正确到相对论的 (υ/c) 一级近似下，这二电荷的电磁互作用可由下列互作用拉格朗日量(Lagrangian)导出。

$$L_{int} = \frac{q_1 q_2}{4\pi\varepsilon_0 r}\left\{-1 + \frac{1}{2c^2}[\upsilon_1\cdot\upsilon_2\right.$$

$$+(v_1\cdot \boldsymbol{r})(v_2\cdot \boldsymbol{r})/r^2]\}$$

这里表示的互作用称为达尔文-布雷特互作用。在处理具有两个以上电子的原子问题时，需要考虑电荷间这一类型的电磁互作用。

Radio Physics
无线电物理学

无线电物理学 radio physics 一门研究电磁运动的基本规律、电磁场与物质相互作用的基本规律并用于开发新型电子器件及应用于系统；研究电磁信息（偏重于高频）的产生、提取、传输、处理、检测和应用的学科。它主要涵盖以下学科方向：(1)电磁场和微波理论与技术；(2)天线与电波传播；(3)光电子学与激光技术；(4)超导电子学；(5)量子电子学；(6)射频与微波波谱学；(7)电子功能材料与新型电子器件等。

一、电子电路
Electronic Circuit

模拟电路 analog circuit 用来对模拟信号进行传输、变换、处理、放大、测量和显示等工作的电路。模拟信号是指连续变化的电信号。

模拟电路是电子电路的基础，它主要包括放大电路、信号运算和处理电路、振荡电路、调制和解调电路及电源等。

集总参数电路 lumped parameter circuit 集总参数元件是指分立的电阻、电感和电容器，由它们所组成的电路称为集总参数电路。

一个实际元件只有当它的尺寸远小于工作波长时才能被看作为集总参数元件，通常当工作频率高到一定时就不能忽略元件及其引线的分布参数效应，有时也可把它们的影响等效为集总参数元件来处理。

分布参数电路 distributed parameter circuit 在高频工作下，传输线的分布参数效应不能被忽略，其电气特性由单位线长上的分布电感 L_0、分布电容 C_0、分布电阻 R_0 和分布电导 G_0 来描述，这时传输线已与串联电感和电阻、并联电容和电导融为一体，利用传输线的分布参数特性所组成的电路就称为分布参数电路，以区别于由集总参数元件组成的集总参数电路。

分布参数 distributed parameter 在高频下工作的传输线，它的分布参数效应不能忽略，表示其电气特性有四个分布参数；即单位长度上的电感称为分布电感 L_0（亨/米）；单位长度上的电容称为分布电容 C_0（法拉/米）；单位长度上的电阻称为分布电阻 R_0（欧姆/米）；单位长度上的漏电阻的倒数称为分布电导 G_0（西门子/米）。

集成电路 integrated circuit 采用平面工艺（半导体工艺或薄膜、厚膜工艺）将电路的元件、器件和互连布线一起制作在半导体或介质基片上构成结构紧凑的微小型化整体电路或系统。它具有体积小、重量轻、性能好、可靠性高、功耗小、成本低和便于批量生产等优点。

集成电路按制作工艺可分为半导体集成电路、薄膜集成电路、厚膜集成电路和混合集成电路，半导体集成电路也称单片集成电路，依所用晶体管结构它又分为双极型集成电路（主要器件为双极型晶体管）和金属–氧化物–半导体（MOS）集成电路（主要器件为场效应晶体管）。集成电路按功能可分为模拟集成电路（线性和非线性）、数字集成电路和微波集成电路；按集成度可分为小规模（在10个门电路或100个集成元件以下）、中规模（在10～100个门电路或100～1000个集成元件）、大规模（在100个门电路或1000个集成元件以上）和超大规模（在1万个门电路或10万个集成元件以上）集成电路。

薄膜电路 thin film circuit 在同一基片上采用薄膜工艺（真空蒸发、溅射、阳极氧化和化学气相淀积等）制作无源元件和互连布线形成无源网络，并组装上分立的半导体器件和微型元件构成的电路称为薄膜混合集成电路，而全部由薄膜工艺制作无源元件、有源器件和互连布线构成的电路称为全薄膜集成电路，目前广泛应用的为薄膜混合集成电路。

通常认为厚度在1.0～1.5μm以下的膜为薄膜。薄膜电路中的薄膜主要有导电膜、电阻膜、介质膜和绝缘膜。

薄膜电路集成度高、尺寸小、精度高、性能好，可工作至毫米波段，但工艺设备贵、成本高。

厚膜电路 thick film circuit 在同一基片上采用厚膜工艺（丝网漏印、烧结和电镀等）制作无源网络并组装上分立的半导体器件、单片集成电路或微型元件而构成的集成电路。

通常认为厚度为几微米至几十微米的膜为厚膜，制作厚膜的材料为导体、电阻、介质、绝缘和包封等五种浆料。

厚膜集成电路工艺简便、成本低廉、能耐较大的功率，但它制作的元件种类和数值范围有一定限制。

谐振 resonance 由电感器和电容器组成的谐振回路在外加信号源激励下将激起振荡，调节电感或电容值，或改变激励源的频率可使激励电压与电流同相，电路阻抗成为一纯电阻，这时振荡最强，称之为谐振。视回路元件电感（L）、电容（C）和激励源相串联或并联，谐振分为串联谐振或并联谐振。

谐振频率 resonance frequency 在外加信号激励下，能在谐振回路或谐振腔中激励起振荡的频率，其值等于系统的固有振荡频率。对于 LC 谐振回路，谐振频率

$$f_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{LC}}$$

对于长度为 l、两端短路的传输线型谐振腔对 TEM 波

$$f_0 = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r}}\frac{p}{2l}$$

对 TE、TM 波

$$f_0 = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r}}\sqrt{\left(\frac{1}{\lambda_c}\right)^2 + \left(\frac{p}{2l}\right)^2}$$

式中 c 为光速，ε_r 为填充介质的相对介电常数，λ_c 为波导的截止波长，$p=1,2,\cdots\cdots$。

品质因数 quality factor 描述谐振回路能量损耗特性和频率选择性的一个物理量。它定义为在谐振时回路中的储能 W 与一个周期内回路损耗能量 W_T 之比的 2π 倍，即有

$$Q = 2\pi\frac{W}{W_T} = \omega\frac{W}{P_L}$$

式中 P_L 为一个周期内回路的平均损耗功率。

如果上述定义中的损耗仅计及回路本身的损耗，这时的品质因数称为固有品质因数 Q_0，金属封闭谐振腔的固有品质因数 Q_0 为

$$Q_0 = \frac{2}{\delta}\frac{\int_V |H|^2 \mathrm{d}V}{\oint_S |H_t| \mathrm{d}S}$$

式中 $\delta = \sqrt{\dfrac{2}{\omega_0\sigma\mu_c}}$ 为腔壁导体的趋肤深度，H 为腔中的磁场强度，H_t 为腔壁导体表面的切向磁场。如果同时包括回路本身的损耗和与之相耦合的外电路（负载）中的损耗，这时的品质因数称为有载品质因数 Q_L，且有

$$Q_L = \frac{f_0}{2\Delta f}$$

式中 f_0 为谐振频率，$2\Delta f$ 为频率响应特性的半功率频宽。

放大器 amplifier 能使电信号幅度和功率放大，且保持信号波形基本不变的电路。构成放大器必须有有源器件和能源，常用的有源器件有电子管、晶体管（双极型或场效应）和变容二极管等，常用的能源是直流电源，有时也利用高频电源作泵源（参量放大器）。放大器在电子技术中占极重要的地位，电信号的产生、发送、接收、变换和处理都是以放大为基础的。

放大器按工作频率可分为直流放大器、低（音）频放大器、中频放大器、射频放大器和视频放大器等；按频率响应特性可分为宽带放大器、窄带放大器和选频放大器等；按功能可分为电压（或电流）放大器、功率放大器、低噪声放大器等。

放大器的主要指标有：增益、频率响应、非线性失真和噪声系数等。

调谐放大器 tuned amplifier 以电容器和电感器组成的调谐回路为集电极（阳极）负载的放大器。调谐放大器的增益和负载阻抗随频率而变化，当回路调谐至待放大信号的中心频率时，回路呈并联谐振，放大器获最大增益，随着信号频率偏离谐振点其增益很快下降，因此它是一种增益高、频率选择性好的窄带放大

器。采用谐振频率适当叉开的双调谐回路或几级调谐放大器级联可以展宽频带。

调谐放大器广泛应用于各类发射机的高频放大器和接收机的高频和中频放大器。

差分放大器 differential amplifier 能把两个输入电压的差值加以放大的电路,也称差动放大器。差分放大器由两个对称的单管放大电路构成,当两输入端信号大小相等、极性相反(称差模信号)时,其输出相加获较大增益;而当两输入端信号大小相等、极性相同(称共模信号)时,其输出相消。因此,它在放大差值信号的同时能抑制共模信号,零点漂移很小,常用于直流放大或要求抑制强共模干扰的场合。它可以是双端(平衡)输入和输出,也可以是单端(非平衡)输入和输出,常用于实现平衡与非平衡电路的相互转换,是各种集成电路的一种基本单元。

运算放大器 operational amplifier 能对信号进行数学运算的放大电路。其输出信号是输入信号的运算(如加、减、乘、除或微分、积分等)结果。目前的运算放大器都采用集成电路工艺制作,其特点是增益高、输入阻抗高、输出阻抗低,且体积小、价格低、工作稳定可靠。它常被用作为同相放大、反相放大、差分输入/输出放大、跟随器(增益为1、输入阻抗极高、输出阻抗极低的缓冲放大器)和模拟加法器、模拟积分器等。因而在直流信号放大、有源滤波器、A/D和D/A转换器、波形的产生和变换,以及信号处理等方面得到广泛应用,是集成电路的主要品种之一。

对数放大器 logarithmic amplifier 输出信号幅度与输入信号幅度成对数函数关系的放大电路。实际的对数放大器总是兼具线性和对数放大功能的,当输入信号弱时,它为线性放大,增益较大;当输入信号强时,它为对数放大,增益随输入信号的增大而减小。对于输入信号范围很宽的接收机,采用对数放大器可使弱信号得到高增益放大,而对强信号则自动降低增益,从而避免饱和失真,因此,它常用于雷达、通信和遥测等领域。

直流放大器 DC amplifier 能够放大直流和慢变化信号的放大电路。直流放大器的最简单型式是直接耦合放大器,其最大的问题是零点漂移,当无信号输入时,其理想输出应无变化(为零或某一参考电位),但由于电源波动、环境因素和元、器件参数变化等将使实际输出产生偏离,这称为零点漂移。为了克服零点漂移常采用差分放大器、运算放大器和双通道斩波直流放大器等形式来实现直流放大。直流放大器常用于高精度电位测量和生物电测量仪器中。

功率放大器 power amplifier 放大信号输出功率以满足负载要求的放大电路。对功率放大器的主要要求是输出功率大、效率高和失真小,它常用于放大电路末级,其后接负载(如天线、扬声器)。功率放大器广泛采用变压器耦合电路,因其损耗小,并能变换阻抗使负载与晶体管相匹配。低频功率放大器可工作在甲类、甲乙类和乙类,高频功率放大器则工作在丙类工作状态,并采用调谐回路作负载以减小失真。

低噪声放大器 low noise amplifier 具有很低噪声系数的放大器。主要用于在放大微小信号时克服放大器本身噪声的干扰。影响放大电路噪声性能的关键是输入级,第一级的噪声对总噪声的影响最大,因此低噪声放大器常用于接收机的高频放大或中频前置放大。现代低噪声放大器常采用晶体管或场效应晶体管放大器或参量放大器。

参量放大器 parametric amplifier 利用电抗参量随时间变化实现低噪声放大的放大器。它通常由信号频率(f_s)回路、泵浦频率(f_p)回路和空闲频率(f_i)回路三部分组成。利用一个高频电源(称为泵源)控制泵频回路中的电抗(C或L)参量作周期性变化,若把该时变电抗接入信频和闲频回路,且使三者频率满足关系:$f_p = f_s + f_i$,则信号就可从泵源中获得能量而放大。参量放大器的特点是低噪声。时变电抗通常采用变容二极管。

反馈 feedback 将部分或全部输出信号通过反馈电路送回输入端称之为反馈。如反馈至输入端的信号与原输入信号相位相反,则为负反馈;反之,则为正反馈。在放大器中常采用负反馈构成负反馈放大器,它虽使放大器增

益降低，但却可提高其工作稳定性、减小波形失真、展宽频带和获得所需的输入阻抗；正反馈虽可提高放大器增益，但将使其工作稳定性、失真、频响等性能变差，故一般不采用，它主要应用于振荡和脉冲电路中。

振荡器 oscillator　指无需外加信号控制能够将直流能量转换为指定频率和波形电信号的电路。

按产生振荡的原理，振荡器可分为反馈振荡器和负阻振荡器；按产生的波形可分为正弦振荡器和非正弦（脉冲波、锯齿波）振荡器。正弦振荡器的主要指标有：振荡频率和频率稳定度、振荡幅度和振荡稳定度以及波形纯度等。

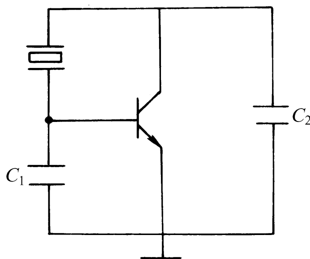
***LC* 振荡器 *LC* oscillator**　由 LC 谐振回路实现正反馈的反馈型正弦振荡器。它由以 LC 回路作为负载的基本放大器和正反馈网络构成，其振荡频率 $\omega_0=1/\sqrt{LC}$。按正反馈网络的不同 LC 振荡器可分为：(1)变压器耦合振荡器，它通过变压器互感耦合实现正反馈；(2)电感三点式（哈脱来）振荡器，它将有一抽头的电感 L 和电容 C 作负载，并通过自耦变压器耦合实现正反馈；(3)电容三点式（毕考兹）振荡器，它将两个串联电容（C_1、C_2）和电感 L 作负载，并通过电容分压实现正反馈。

***RC* 振荡器 *RC* oscillator**　由 RC 选频网络实现正反馈的反馈型正弦振荡器。其振荡频率 $\omega_0=1/RC$，适用于产生 1Hz～1MHz 的低频振荡。常用的 RC 振荡器有：(1)文氏桥振荡器，它以文氏电桥作为正反馈网络。它的优点是频率调整方便且范围宽，输出波形好而且稳定。(2)移相振荡器，它由三节 RC 移相网络串联使之产生 180°相移加上反相放大器的反相作用构成正反馈网络。其优点是结构简单，但输出波形差，频率不易调整。

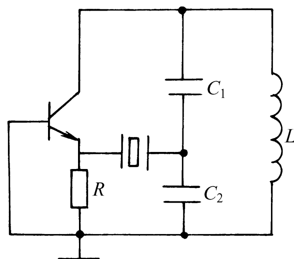
负阻振荡器 negative-resistance oscillator　利用具有负阻特性的有源器件和 LC 谐振回路组成的正弦振荡器。负阻器件按其 $V-I$ 特性不同可分为：(1)电压控制型，其电流是电压的单值函数，如隧道二极管，它与串联 LC 回路相连接；(2)电流控制型，其电压是电流的单值函数，如双基极二极管，它与并联 LC 回路连接。当负阻所提供的能量能够补偿外电路（LC 回路和负载）正阻的损耗时，电路即可维持稳定振荡。

晶体振荡器 crystal oscillator　以石英晶体谐振器取代 LC 回路作为谐振回路所构成的正弦振荡器。由于晶体的高 Q 特性，晶体振荡器的频率稳定度达 10^{-5}量级，如加恒温后可高达 10^{-9}～10^{-11}量级。

晶体振荡器按晶体在电路中的作用可分为并联型和串联型两类，前者晶体等效为电感，它与电容 C_1、C_2 组成并联谐振回路，振荡频率在晶体的并联谐振频率附近；后者晶体等效为一个高选择性的串联谐振元件，在串联谐振频率下提供强的正反馈。



(a)并联型



(b)串联型

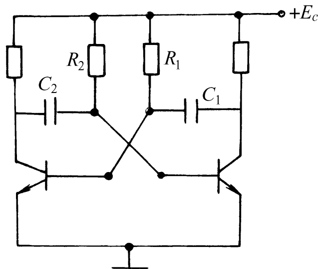
晶体振荡器原理图

压控振荡器 voltage control oscillator　一种输出振荡频率随输入控制电压而变化的振荡

器。压控振荡器按所用的振荡元件可分为 LC 压控振荡器、RC 压控振荡器和晶体压控振荡器,目前大多已制成集成电路压控振荡器。它们通常采用变容二极管作为压控元件,将输入控制电压加在变容二极管上控制其电容变化,从而改变振荡回路参数而控制输出振荡频率。

压控振荡器的主要指标有:频率稳定度,控制灵敏度和调频范围等。

多谐振荡器 multivibrator 一种阻容耦合式的矩形波发生器。它由两级阻容耦合倒相放大器并联接成正反馈环路组成(如图所示)。它只有二个准稳态,不需任何外加触发脉冲,一接通电源便能自激振荡,产生矩形波,所以也称为自激多谐振荡器。其缺点是频率稳定性差。



调制 modulation 将带有信息的消息信号加载到一个载波上,使载波的某些特性随欲传送的消息信号而变化的过程称为调制。调制的目的主要是提高信号在信道上的传输效率或是实现信道复用或是提高抗干扰能力。按调制信号是模拟信号还是数字信号调制分为模拟调制和数字调制。模拟调制按被调信号是正弦波还是脉冲序列又可分为正弦波调制和脉冲调制,按被调制参量的不同,正弦波调制分为调幅(AM)、调频(FM)和调相(PM);脉冲调制分为脉幅调制(PAM)、脉宽调制(PWM)和脉位调制(PPM)。数字调制以正弦波为被调信号,有移幅键控(ASK)、移频键控(FSK)和移相键控(PSK)。

调幅 amplitude modulation(AM) 使正弦波载波的振幅随调制信号而变化的调制称为正弦波振幅调制,简称调幅(AM)。

理想的单频调幅信号 $u_A(t)$可表示为

$$u_A(t) = U_c(1 + m_a\cos\Omega t)\cos(\omega_c t + \varphi)$$

式中 U_c、ω_c、φ 分别为载波的振幅、角频率和相位,Ω 为调制信号角频率,m_a 称为调幅系数,其值在 0~1 之间,它正比于调制信号振幅 U_Ω。调幅信号的频谱包含载频 ω_c、上边带 $\omega_c+\Omega$ 和下边带 $\omega_c-\Omega$。

常用的调幅方法有:(1)平方律调幅,利用电子器件 $V-I$ 特性曲线平方律部分的非线性作用进行调幅;(2)斩波调幅,将调制信号按载波频率 f_c 来斩波,然后由中心频率为 f_c 的带通滤波器取出其调幅成分。调幅技术的设备简单、频谱较窄,但抗干扰性能差。

调频 frequency modulation(FM) 使正弦波载波的频率随调制信号而变化的调制称为正弦波频率调制,简称调频(FM)。理想的单频调频时,载波的瞬时角频率 $\omega=\omega_c+\Delta\omega\cos\Omega t$,调频信号 $u_F(t)$可表示为

$$u_F(t) = U_c\cos\left(\omega_c t + \frac{\Delta\omega}{\Omega}\sin\Omega t + \varphi_0\right)$$

式中 $\Delta\omega = k_f U_\Omega$ 称为频偏,它与调制波振幅 U_Ω 成正比,$\frac{\Delta\omega}{\Omega} = m_f$ 称为调频指数,它可为任意正数,与调制频率 Ω 成反比。调频信号的频谱包含 ω_c、$\omega_c\pm\Omega$、$\omega_c\pm2\Omega$、$\omega_c\pm3\Omega$…… 调频波的带宽为 $B\approx2(m_f+1)F(F=\Omega/2\pi)$。

调频方法有直接调频和间接调频两类,前者是由调制信号直接控制载波振荡回路中的 L 或 C 从而调制其瞬时频率;后者是先将调制信号积分,然后对载波进行调相而获得调频波。与调幅波相比,调频波具有较强的抗干扰性能,但它需占有较宽的频带。

调相 phase modulation(PM) 使正弦波载波的瞬时相位随调制信号而变化的调制称为正弦波相位调制,简称调相(PM)。理想的单频调相信号 $u_\varphi(t)$可表示为

$$u_\varphi(t) = U_c\cos(\omega_c t + \Delta\varphi\cos\Omega t + \varphi_0)$$

式中 $\Delta\varphi$ 为载波的最大相移,称为调相指数,它与调制波振幅 U_Ω成正比,但与调制角频率 Ω 无关。调相信号的频谱包含 ω_c、$\omega_c\pm\Omega$、

$\omega_c \pm 2\Omega$、$\omega_c \pm 3\Omega$……。调相波的带宽为 $B \approx 2(\Delta\varphi + 1)F(F = \Omega/2\pi)$，在 $\Delta\varphi$ 固定时，带宽与 Ω 成正比，因此其频带不能充分利用，这是它与调频波的最大区别。

调相方法通常有三类：(1)用调制信号控制谐振回路或相移网络的电抗或电阻元件以实现调相；(2)矢量合成法调相；(3)脉冲调相。

单边带调制 single sideband modulation 将整个调制信号的频谱从基带平移到一个较高的频率上的调制技术。因为调幅波的频谱中包含载波、上边带和下边带，因此单边带调制可看作为在调幅波中抑制载波和一个边带后只留下一个边带的调制方法。最常用的单边带调制方法是滤波法，它是用平衡调制器产生抑制载波的双边带信号，再用边带滤波器滤除无用边带。单边带调制具有节省功率、节省频带和抗干扰性能好等优点，但其设备较复杂。

解调 demodulation 解调是从已调波中恢复原调制信号的过程，它是调制的逆过程。对应于不同的调制方法，正弦波调制的解调分别采用检波器、鉴频器和鉴相器；脉幅和脉宽调制的解调，由于其已调信号中含有较大的调制信号频谱分量，所以直接对已调波进行低通滤波即可实现解调；脉位调制的解调是先将它转换为脉幅或脉宽调制波，然后再解调；数字调制的解调可采用相干或非相干解调，它们分别利用已调波的相位或幅度信息实现解调，相干解调由时间相关器、采样器和比较判决器构成，非相干解调由包络检波器、采样器和比较判决器构成。

检波 amplitude detection 从调幅波中提取调制信号的过程。检波的方法通常有包络检波和同步检波。前者是从调幅波的包络中提取调制信号，它先对调幅波进行整流，得到随包络变化的脉动电流，然后再由低通滤波器滤去高频分量；后者先将调幅波与本机产生的与已调波载波同频率的相干信号在乘法器中相乘，其输出中即包含低频的调制频率分量，然后采用低通滤波器滤除高频分量。对检波器的要求是检波效率高、失真小和输入阻抗高。

鉴频 frequency discrimination 从调频波中提取调制信号的过程。它也称为频率检波。鉴频的方法主要有三种：一是先将等幅调频波变换为幅度正比于调频波频率变化的调频调幅波，再进行幅度检波，提取调制信号，称为斜率鉴频器；二是先将调频波变换为重复频率等于调制波频率的等幅脉冲序列或者变换为宽度正比于调制波频率变化的等幅脉冲序列，再通过滤波取出平均分量，恢复调制信号，称为脉冲计数式鉴频器；三是先将调频波变换为附加相移按调频波频率变化的调频调相波，再进行相位检波，检出调制信号。鉴频器的主要指标有：鉴频灵敏度(鉴频跨导)、频带宽度和非线性失真。

鉴相 phase detection 使输出信号的幅度随两个输入信号的瞬时相位差而变化的过程。通常有一个输入信号的相位是参考相位。鉴相器由模拟乘法器组成。鉴相不仅用于调频和调相波的解调，且广泛用于锁相技术和频率合成技术中。

混频器 mixer 将两个不同频率的输入信号变换为另一个新频率电信号的装置。输入信号分别是载波频率为 f_s 的接收信号和频率为 f_L 的本地振荡信号，输出信号频率 f_i 可以是它们两者之差或和，或者它们各次谐波的差或和，即

$$f_i = |\pm pf_s \pm qf_L|$$
$$(p = 1,2,3,\cdots;\ q = 1,2,3,\cdots)$$

该输出信号除中心频率不同于接收信号外，其调制特性不变。混频器由非线性器件(如二极管、晶体管)、本地振荡器和滤波电路组成，非线性器件用于实现混频，滤波电路用于选出所需的输出信号而滤去其他频率分量的信号。

变频器与混频器作用相同，通常将混频和本地振荡由同一器件实现的装置称为变频器。

常用的混频器有：二极管混频器、三极管混频器、平衡混频器、环形混频器和参量混频器等。混频器的主要技术指标有：变频增益、噪声系数、变频失真和选择性等。

本地振荡器 local oscillator 在混频器中，为了与接收信号在混频元件中产生差拍输出信号，需要混频器内部产生一个等幅振荡信号，产生该信号的振荡器就称为本地振荡器。对

本地振荡器的要求是：振荡频率稳定且可进行电调、噪声小。

平衡混频器 balanced mixer 混频器的一种，它将信号和本振功率平分后分别加到两个性能参数相近的混频管上混频，其两路中频输出叠加可使本振噪声反相相消，而信号同相相加。它的主要优点是：(1)抑制本振噪声，降低噪声系数；(2)减弱信号与本振之间的耦合(使输出的谐波及其组合干扰成分减少)。

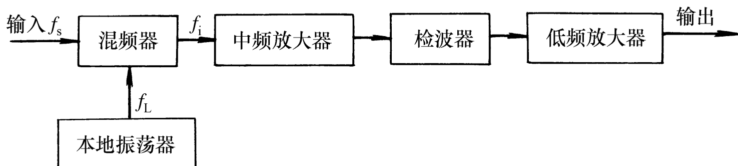
倍频器 frequency multiplier 将一给定频率(f_s)的输入信号变换为它的整数倍频率(nf_s)的输出信号的装置。它一般由非线性元件和滤波电路组成，前者用于频率变换，其输出频率包含输入频率的各次谐波和它们之间的组合频率，后者用于选出所需的某个倍频信号而滤去其他频率分量。

倍频器输出信号的频率稳定度与被倍频的信号的相同，因此可用一个稳频的低频信号来产生一个稳频的高频信号。

分频器 frequency divider 将一个给定频率(f_s)的输入信号变换为它的整数分之一频率(f_s/n)的输出信号的装置。分频器输出信号的频率稳定度与被分频信号的相同，因此常用一个高频率稳定度的晶体振荡器作输入来产生所需的其他频率成分。

分频器按被分频信号波形的不同可分为正弦分频器和脉冲分频器，前者由用于产生分频的非线性元件和用于选频的滤波电路组成，后者由利用非线性元件的开关特性组成的脉冲数字电路构成。

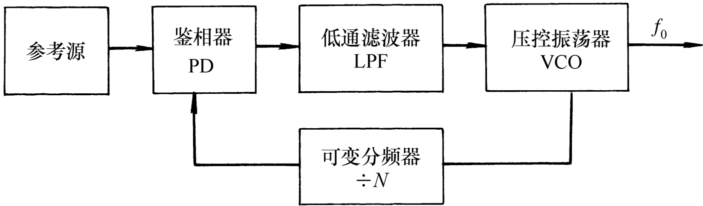
超外差 superheterodyne 接收机的一种制式，其工作原理如图。它将所接收的输入信号f_s与本地振荡信号f_L经混频器混频后产生一个固定的中频信号$f_i=f_L-f_s$，然后再进行放大接收。它的优点是：(1)灵敏度高，易于获得足够大而且稳定的放大量；(2)选择性好，易于调整，因为中频是固定的，故中频放大器可采用较复杂的调谐或滤波电路以提高其性能。它的缺点是：电路比较复杂，且易于受到一些特定频率信号的干扰，如镜频干扰($f'_s=f_L+f_i$)、组合频率干扰和中频干扰等。



频率合成 frequency synthesis 用一个或几个频率高度稳定和准确的参考频率源产生多个新频率的等幅振荡，其频率稳定度取决于参考频率源。

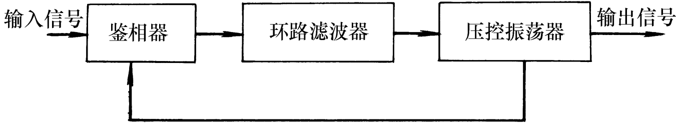
频率合成分为直接合成法和间接合成法。直接合成法是将标准源输出经混频器、倍频器或分频器后产生大量新的频率成分然后经可变滤波器选频后输出，它的优点是：频率范围宽，分辨率高，转换速度快，相位噪声小；缺点是需用大量带通滤波器，设备大而复杂，成本高。间接合成法是用锁相环来实现的，其原理如图。压控振荡器(VCO)的输出一部分经可变分频器分频后(f_0/N)在鉴相器(PD)内与参考源作相位比较，鉴相器的输出经低通滤波器(LPF)加到VCO的压控元件上以控制它的输出频率，当VCO频率漂移，PD输出随之变化从而锁定VCO输出稳定；而改变可变分频器分频比N就可获得多种稳定的频率输出。间接合成法又称锁相环法，其优点是便于集成化，体积小，成本低；缺点是分辨率不甚高，频率转换速度较慢(因为环路锁定需要一捕捉时间)。

频率合成器的主要指标是：频率稳定度和准确度、频谱纯度、频率范围和频率间隔以及频率转换时间等。频率合成广泛应用于通信、导航、雷达、电子对抗和测量等领域。



锁相环　phase-locked loop　它是一个通过相位负反馈使输出振荡的频率和相位与输入信号保持确定关系的闭合环电路。锁相环最初用于改善电视接收机的行同步和帧同步以提高抗干扰能力,在彩色电视机中,它由鉴相器、环路滤波器和压控振荡器组成(如图)。

鉴相器用于鉴别输入和输出信号间的相位差,并输出误差电压,经环路低通滤波器滤除噪声和干扰后加至压控振荡器控制其输出信号的频率和相位,使其与输入信号同步。



根据描述环路动态过程微分方程的阶数,锁相环可分为一阶、二阶和高阶环路。一阶环路是没有环路滤波器的锁相环;二阶环路是采用一阶滤波器(如有源或无源比例积分滤波器)作为环路滤波器的锁相环;高阶环路是采用二节以上一阶滤波器作为环路滤波器的锁相环。应用最广的为二阶锁相环。

微弱信号检测　detection of weak signal　指对湮没在背景噪声中的微弱信号的测量,由于微弱信号本身的涨落、背景和放大器噪声的影响限制了它的测量灵敏度。其内涵为利用电子学和信息论的方法,研究噪声的成因和规律,分析信号的特点和相关关系,发展新的检测原理、器件和技术。研究的内容有:噪声物理、微弱信号检测理论、低噪声设计、弱信号传感器和信号提取技术等。目前常用的微弱信号检测方法有:窄带滤波法、同步积累法、锁定接收法(锁定放大器)、取样积分法(取样积分器)等。在物理、化学、生物、医学、地球物理、考古、大气、海洋、环境科学、生命科学以及新技术等各方面都发展了微弱信号检测的应用。

锁定放大器　lock-in amplifier　广义地说,锁定放大器是指一种能测量湮没在噪声中的信号振幅和相位的电压表。一般的放大器,在放大信号的同时也将噪声放大,因而不能检出湮没在噪声中的信号,而锁定放大器则能在检测放大信号的同时,将噪声抑制掉。其基本原理是:将伴有噪声的输入信号与一同频率的参考信号通过相敏检波器相乘以后积分,便可取出信号的振幅和相位,而噪声在此过程中只要积分时间足够长,便可被抑制掉。积分器一般由 RC 低通滤波器或有源滤波器等组成。

取样积分器　sampling integrator　一种可以将湮没在噪声中的重复性信号波形或瞬时值提取出来的电子仪器。它采用取样积分技术,也就是利用很窄的并与信号同步的取样脉冲,对被湮没在噪声中的输入信号进行取样,再利用噪声与信号的非相关性,通过 RC 低通滤波器对取出的样品进行同步积累,若同步积累 M 次,由于信号是有规则的,其强度以 M 倍增长,而噪声是随机量,仅按 $\sqrt{M}$ 倍增长,则检出的信号其信噪比提高了 $\sqrt{M}$ 倍,从而达到抑制噪声以提取信号的目的。

滤波器　filter　能够有选择地通过或阻止某频率范围信号的电路或器件。按通过频带的

不同滤波器分为低通、高通、带通、带阻和梳齿滤波器。低通和高通滤波器的通带分别低于或高于某个截止频率；带通和带阻滤波器的通带或阻带分别介于两个截止频率之间；梳齿滤波器有许多按一定频率间隔相间排列的通带和阻带。滤波器中常采用的各种谐振元件有电感、电容、晶体等。

无源滤波器的设计常以低通滤波器作为原型，而高通、带通、带阻滤波器的设计可通过参量变换方法从低通原型获得。按滤波器的通带衰减特性的不同，它可分为最大平坦（巴特沃思）型、等波纹（切比雪夫）型和椭圆函数型等。

滤波器的主要指标是：通带衰减、阻带衰减和截止频率等。

有源滤波器 active filter 含有有源器件的各种滤波电路。在高频范围，常用电感器和电容器组成滤波网络，称为无源滤波器，在低频范围若用无源网络其电感、电容值将非常大，不但体积大、重量重，而且损耗大、滤波特性差。有源滤波器采用电阻器、电容器、晶体管和运算放大器组成，有的还使用特殊有源器件如电荷耦合器件（CCD）、电流传送器等，其特点是小型化和集成化，适用于较低频率信号的滤波，广泛应用于通信、测量等领域。

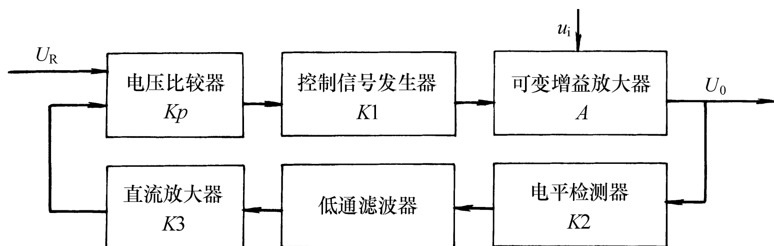
数字滤波器 digital filter 由数字加法器、乘法器和延时单元组成，可对输入的数字代码信号进行运算处理以达到改变信号频谱的装置。它可以由大规模集成电路硬件或用计算机软件实现。用数字滤波器处理模拟信号时，其输入和输出端必须分别装有模-数（A－D）和数-模（D－A）变换器。

数字滤波器具有高精度、高可靠性、可程控改变特性和复用以及便于集成等优点。它广泛应用于语音信号、图像信号和生物医学信号的处理以及通信和雷达等领域。

自适应滤波器 adaptive filter 能够根据输入和输出信号的统计特性自动求解和调整滤波器系数，使其达到最佳滤波性能的一种装置。确定自适应滤波器系数的准则是使输出信号序列与期望输出序列的均方误差为最小，其算法称为最小均方算法或 LMS 法。

自适应滤波器应用于通信中的自动均衡、回波消除、天线阵波束形成及有关信号处理中的噪声消除、参数识别和谱估计等。

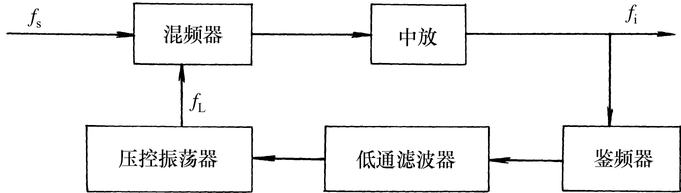
自动增益控制 automatic gain control（AGC） 根据输入信号的强弱而自动调整放大器的增益使输出信号幅度保持相对稳定的过程。自动增益控制原理电路如图：



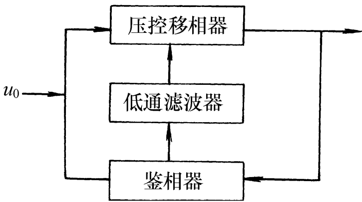
反馈网络检测（$K2$）输出信号电平，滤去不需要的高频分量，经直流放大（$K3$）后在电压比较器（Kp）中与一恒定的参考电平 U_R 比较，产生一误差信号，再通过控制信号发生器（$K1$）去控制可控增益放大器（A）的增益，以使其输出 U_0 维持稳定。

自动频率控制 automatic frequency control（AFC） 根据接收信号频率的变化而自动控制进入某通道（如中频放大器）的信号频率使之保持调谐以获得稳定的谐频增益的过程。自动频率控制电路由鉴频器、低通滤波器和压控振荡器组成，如图，当接收信号频率 f_s 或本振信号频率 f_L 漂移致使中频 f_i 随之漂移时，鉴频器便输出一误差电压，控制作为本地振荡器

的压控振荡器的输出频率自动调整，以保证混频输出稳定接近中频。



自动相位控制 automatic phase control (APC) 根据输入信号的相位变化自动调整电路的相移使输出信号相位保持稳定的过程。自动相位控制原理电路如图，由鉴相器检出输入与输出信号的相位差，经低通滤波器滤去不需要的分量，去控制压控移相器的相移，以使输出信号相位保持稳定。



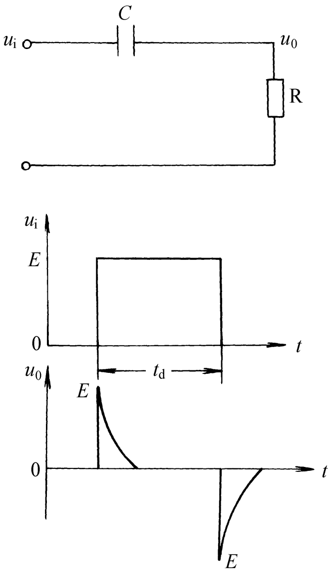
数字电路 digital circuit 用来对数字信号进行传输、变换、处理、放大、测量和显示等工作的电路。数字信号是指一连串不连续电位变化的窄脉冲信号，通常用二进制数“0”和“1”组合的代码序列来表示。

数字电路的主要构成单元是门电路和触发器以及由触发器组成的计数器和寄存器。数字电路广泛应用于通信、计算机、信息处理和各种程序控制系统中。

微分电路 differential circuit 使输出电压 u_0 与输入电压 u_i 的时间变化率 $\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}$ 成正比的电路。最简单的微分电路如图。电路时间常数 $\tau = RC \ll t_d$，有：$u_0(t) \approx RC\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}$

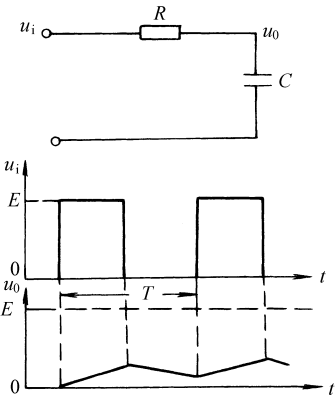
当输入方波 u_i 正跳变 E 时，R 上也发生正跳变 $u_0 = E$，然后随着向电容器 C 充电，u_0 逐渐下降，约经 3τ 时间降至近于零，当输入 u_i 为负跳变时，u_0 变化亦类似（见下图）。

微分电路常用于脉冲电路和测量仪器中。



微分电路及其波形

积分电路 integrating circuit 使输出电压 u_0 与输入电压 u_i 的时间积分值 $\int_0^t u_i(t)\mathrm{d}t$ 成正比的电路。最简单的积分电路如图。电路的时间常数 $\tau = RC \gg T$，有：$u_0 \approx \frac{1}{RC}\int_0^t u_i(t)\mathrm{d}t$，在方波宽度内，$u_0(t) \approx \frac{E}{RC}t$，即与 t 成线性关系。当输入方波正、负跳变时，由于电容器 C 充、放电很慢，于是 u_0 便形成三角形状的脉冲波（见下页图）。



积分电路及其波形

逻辑门电路 logic gate circuit 信号取值为“0”和“1”、且输入信号和输出信号之间具有一定的逻辑运算关系的电路。它是数字电路的基本部件之一。逻辑门电路的基本形式有：“与”、“或”、“非”、“异或”、“与非”、“或非”等，当两个输入信号为a、b，一个输出信号为c时，它们之间满足的逻辑关系如下表：

与			或			非	
a	b	c	a	b	c	a	c
0	0	0	0	0	0	0	1
0	1	0	0	1	1	1	0
1	0	0	1	0	1		
1	1	1	1	1	1		

异或			与非			或非		
a	b	c	a	b	c	a	b	c
0	0	0	0	0	1	0	0	1
0	1	1	0	1	1	0	1	0
1	0	1	1	0	1	1	0	0
1	1	0	1	1	0	1	1	0

现代逻辑门电路常采用集成电路，常用的有TTL电路(晶体管-晶体管逻辑电路)和CMOS(互补金属-氧化物-半导体)逻辑门电路。逻辑门电路广泛应用于计算机、通信、自动控制和仪表等数字化领域。

记数器 counter 一种能记录电路中出现的脉冲数目的电路。它有加法计数器、减法计数器和可逆计数器(可加、可减)等多种。计数方式有非同步计数和同步计数，前者每来一个时钟脉冲CP，多级计数器的前级先翻转，然后再用前级的翻转去触发后一级的翻转，故速度较慢；后者将时钟脉冲CP加到计数器的每一级上使各级该翻转的触发器同时翻转，故速度快，但电路较复杂。计数器是数字通信和计算机中不可缺少的逻辑部件。

触发器 trigger 在外加信号触发下能够转换工作状态的电路。触发器分两类：一类是双稳态触发器，它有两个稳定状态：“0”和“1”，在不同的输入触发下，可被置成“0”状态，也可被置成“1”状态，它可用来构成各种计数器、分频器和寄存器等。另一类是单稳态触发器，它有一个稳定状态和一个暂时稳定状态，无外加信号触发时处于稳定状态，当受外加触发时转入暂时稳定态，经短暂时间后又自动返回稳定态，它可用于脉冲整形和延时。

现代触发器都用集成电路实现，根据逻辑功能不同触发器可分为R-S触发器、T触发器、D触发器和J-K触发器，它们的逻辑符号及真值表如下：

名称	R-S 触发器	D 触发器
逻辑符号	$\bar{Q}$ Q R S	$\bar{Q}$ Q R S D CP
真值表	S R Q_{n+1} 1 1 保持 0 1 1 1 0 0 0 0 不确定	D Q_{n+1} 0 0 1 1

名称	T 触发器	J-K 触发器
逻辑符号	$\bar{Q}$ Q R S T	$\bar{Q}$ Q R S ICPK
真值表	T Q_{n+1} 0 Q_n 1 Q_{n+1}	J K Q_{n+1} 0 0 Q_n 0 1 0 1 0 1 1 1 Q_n

记忆电路 memory circuit 一种具有记忆功能的逻辑电路。如在输入端加一个单位阶跃信号使电路处于某一新状态,然后撤去输入信号而电路仍能保持这种状态,即表明电路具有记忆功能。双稳态触发器是一种基本的记忆电路,磁性元件也是一种记忆元件,利用它们可以组成带记忆能力的部件,如计数器、寄存器和存储器等。

MOS 电路 metal-oxide-semiconductor circuit 以金属–氧化物–半导体(MOS)器件为基本元件的集成电路。通常分为 NMOS、PMOS 和 CMOS 三类,它们分别由 N 型沟道、P 型沟道 MOS 器件和 N 沟与 P 沟 MOS 器件互补构成。与双极型集成电路相比,MOS 电路具有工艺结构简单、功耗低、集成度高、设计灵活和输入阻抗高等优点。它不但广泛用于数字电路(如微处理器、存储器)的集成,也广泛应用于模拟电路(如运算放大器、滤波器)的集成。

组合逻辑电路 combinational logic circuit 任何时刻的输出仅取决于该时刻的输入、而与电路过去状态无关的逻辑电路。组合逻辑电路可以有多个输入、多个输出,输出与输入之间没有反馈回路,且电路中不包含记忆单元。组合逻辑电路的分析方法是根据逻辑图,逐级写出输出表达式,经逻辑函数化简得出最简输出逻辑函数表达式,从而确定电路的逻辑功能。

时序逻辑电路 time sequence logic circuit 任何时刻的输出不仅取决于当时的输入,而且与电路原先的状态有关的逻辑电路。时序逻辑电路由组合逻辑电路和存储电路组成。时序逻辑电路可分为同步时序电路、脉冲异步时序电路和电平异步时序电路,同步时序电路和脉冲异步时序电路中的存储单元都由触发器组成,不过前者触发器状态的改变由统一的时钟脉冲控制,而后者触发器状态的改变由各触发器的时钟脉冲控制;电平异步时序电路中的存储单元则是由延迟单元组成。

可编程逻辑器件 programable logic device (PLD) 一种通用的、可编程的数字逻辑器件,它是一种“与”矩阵和“或”矩阵的两级逻辑结构的器件。采用 PLD 可对器件进行设计,通过设计芯片来实现系统功能,由设计者定义器件内部逻辑和管脚,并可反复编程、修改逻辑。PLD 的出现极大地方便了数字系统的设计,它是电子设计自动化的基础之一。可编程逻辑器件的品种有:可编程只读存储器(PROM)、可编程逻辑阵列(PLA)、可编程阵列逻辑(PAL)、通用阵列逻辑(GAL)、可编程门阵列(PGA)、现场可编程门阵列(FPGA)和在线可编程逻辑器件(ispLSI)等。可编程逻辑器件在计算机、工业控制、智能仪器仪表、现代通信和家用电器等领域有广泛应用。

模糊逻辑控制器 fuzzy logical controller (FLC) 采用模糊逻辑控制算法的控制器。它将模糊逻辑语言控制策略变为有效的自动控制策略。模糊逻辑是由美国加利福尼亚大学扎德(L·A·Zadeh)在 1965 年提出的。他把只取 0 和 1 二值的经典集合概念推广在[0,1]区间上取无穷多值的模糊集合概念,其基本理论有逻辑基础、FUZZY 算法、FUZZY 模型和 FUZZY 集合公理等。模糊逻辑控制器由三个基本部分构成:(1)将输入的确切值“模糊化”,成为可用模糊集合描述的变量;(2)应用语言规则进行模糊推理;(3)对推理结果进行决策并清晰化,使之转化为确切的控制量输出。典型的模糊逻辑控制器是两个输入(一般为偏差和偏差变化)、一个输出(控制量)的控制器。世界上第一块模糊逻辑控制器芯片于 1986 年在美国贝尔实验室诞生。模糊逻辑控制器在通信、导航、自动控制、人工智能和家用电器等领域有广泛应用。

电荷耦合器件 charge coupled device (CCD) 由时钟脉冲电压产生和控制半导体势阱的变化,实现存储和传递电荷信息的固态电子器件。实际上电荷耦合器件是一种用电荷量表示不同状态的动态移位寄存器。电荷耦合器件由间隔极小的金属–氧化物–半导体电容器阵列和适当的输入、输出电路构成,常见的结构有表面沟道、体沟道和蠕动型等。电荷耦合器件主要应用于固态成像、信号处理和大容量存储器三个方面。在遥感、雷达、通信、电子计算机、电视摄像等领域具有重要应用。

模数转换(A/D 转换) analog-to-digital con-

verter　模/数转换是将连续模拟信号转换为脉冲数字代码信号的过程，又称为 A/D 转换或 ADC，它是数字化技术中的关键技术。模/数转换的过程是采样、量化、编码。为了能不失真地恢复原信号，采样频率应大于或等于原信号包含的最高频率的两倍（取样定理）。模数转换电路形式可分为直接法和间接法，直接法是通过一组基准电压直接与采样保持信号比较，将比较器输出编码为数字量，其优点是转换速度快，如并行比较型 ADC 和逐位逼近型 ADC；间接法是先将采样保持模拟信号电压转换成间接物理量——时间 T 或频率 F，然后再将它通过计数器等时序网络转换成数字量，其优点是转换精度高，但速度慢，如双积分型 ADC。目前 ADC 常制成集成电路。模数转换器的主要指标有：转换精度和转换速度。

取样定理　sampling theorem　取样定理表明：一个频谱限制在$(0, f_m)$赫兹内的基带连续信号 $f(t)$，惟一地被均匀间隔 $T_s \leqslant 1/2B$ 秒($B = f_m$)的取样序列 $f(kT_s)$所确定。也就是说：(1)如果以时间间隔 $T_s \leqslant 1/2B$ 秒对连续信号 $f(t)$取样，则 $f(t)$的全部信息都包含在取样序列中而没有丢失；(2)反之，利用该取样序列可以不失真地恢复原来的基带信号 $f(t)$。并称：$T_s = 1/2B$ 为奈奎斯特(Nyquist)间隔；$f_s = 2B$ 为奈奎斯特(Nyquist)速率。

数模转换（D/A 转换） digital-to-analog converter　将脉冲数字代码信号转换为连续模拟信号的过程，又称为 D/A 转换或 DAC。如接收的数字信号为 $D = a_1 2^{-1} + a_2 2^{-2} + \cdots\cdots + a_n 2^{-n}$($a_i = 0$ 或 1)，参考信号为 R，则其产生的模拟信号为 A＝RD。数模转换器通常由参考电压源、电阻网络和电子开关三部分组成，常用的电阻网络有：R－2RT 型求和网络、R－2R 倒 T 型电阻网络和权电阻求和网络，网络的每一位有一电子开关由输入数码“1”或“0”控制其开关，然后将各位输出相加而获得模拟信号。目前 DAC 常制成集成电路。数模转换器的主要指标有：分辨率和转换速度。

脉码调制　plus-code modulation　将模拟信号转换为脉冲数字信号的调制方式，简称 PCM。它是模-数转换的基本方法之一，通常分为采样、量化和编码三个过程，采样是按一定的时间间隔取出连续信号幅度的瞬时值，为了使取样脉冲序列中能包含连续信号的全部信息，以便能原样恢复，应使取样间隔 $T_s \leqslant \frac{1}{2B}$ 秒(B 为连续信号中的最高频率)；量化是将采样值按给定的分层（通常为 128 层）用“四舍五入”法成为整数，为了减小量化噪声，应采用非线性量化或自适应量化，即使权量化器的量化分层间隔为非均匀的，在概率大的区域分层间隔小，常采用国际标准规定的折线近似对数压扩非线性量化：分为 A 律（中国和欧洲采用）和 μ 律（日本和北美采用）；编码是将量化值表示为一组二进制脉冲。脉冲编码调制具有抗干扰性好、失真小等优点，但其设备较复杂、占用频带宽。

增量调制　delta modulation　一种特殊的脉冲编码调制方式，简称 DM 或 ΔM。它是按一定时间间隔对连续信号瞬时值的增量进行采样、量化和编码，如后一个采样瞬时值与前一个的之差为正，则编码为“1”，反之则编码为“0”，因此差值码组仅有一位二进制码。为了克服简单增量调制动态范围窄的缺点，还有多种改进的增量调制，如自适应增量调制、连续增量调制、总和增量调制和双积分增量调制等。增量调制与脉码调制相比的优点是编码与解码电路比较简单、数据率较低和抗信道误码性能好。

编码　coding　将消息信号转换为发送的数字代码的过程。通常包括信源编码、信道编码和保密编码。信源编码是将信源模拟信号数字化或将数字信号进行压缩编码以提高传输速率和减小消息冗余度；信道编码是为了提高通信的可靠性使在接收端可以发现和纠正误码而采取的编码措施，也称为纠错编码；保密编码是在保密通信中在信源编码之后再对信号进行加密的编码措施。

信源编码　information source coding　对信源信号作某种变换，包括将信源模拟信号数字化和将数字信号进行压缩编码以提高传输速率和减小消息冗余度。信源编码有两大类：波形编码和参量编码，波形编码是直接将时域波

形变换为数字化码序列,常用的有脉冲编码调制(PCM)、差分脉冲编码调制(DPCM)、增量调制(DM 或 ΔM)和线性预测编码等;参量编码是利用信号处理技术在频率域或其他正交变换域提取信号的特征参量再变换成数字码,常用的有各种类型的声码器。

纠错编码 error correcting coding 为了减少信道传输中由于干扰引起的误码而在原来的数字码元中人为地按一定规律加入一些起校验监督作用的数字码元(称校验码元)使原来不相干的信息码元序列具有相关性,从而在接收端可以发现和纠正误码,提高通信的抗干扰能力和可靠性。常用的纠错编码方法有:线性分组码、循环码和卷积码等。

译码 decoding 译码是将接收的数字信号恢复为原来的消息信号的过程,它是编码的逆过程,它也可分为信源译码、信道译码和解密译码。

稳压电源 regulated power supply 一种能为电子设备或电路提供稳定交、直流电源的通用电源设备。当输入电压、负载、环境温度和电路参数等在一定范围内变化时,稳压电源输出的电压或电流能维持相对恒定。直流稳压电源一般由整流、滤波和调整控制三部分组成;交流稳压电源一般利用磁饱和原理或电子器件进行调整。

稳压电源的主要指标有两类:特性参数:输出电压、输出电流、电压调节范围;质量参数:稳压系数、波纹电压、稳定度和输出阻抗等。

开关电源 switching mode power supply 用晶体管或场效应管作为开关元件,以较高频率控制开并通断时间比,将输入交流(或直流)电压转换为所需稳定的直流输出电压的装置。传统的线性稳压电源先用变压器降低电压、经整流滤波成直流然后通过反馈稳压电路输出稳定的直流电压,开关电源则直接将 220V 交流电整流滤波成直流,用开关元件高速控制其通断,取其平均值为所需电压值,同时用反馈电路控制其通断比(称脉冲调意)达到稳定输出电压的目的。与线性电源相比,开关电源可省去体积大而笨重的电源变压器,开关元件损耗很小,开关频率高,所附属的外围元件也小,因此开关电源的体积小、重量轻、效率高(一般在 80%以上),已广泛应用于各种电器(如程控电话交换机、计算机和电视机等)中。

不间断电源 uninterruptive power system (UPS) 在外电网(市电)供电中断时,具有发电机作用能使供电在一定时间内继续的设备。UPS 主要由整流、蓄电池组和逆变器组成。市电输入经整流将交流变为直流,一方面给蓄电池充电,另一方面为逆变器提供能量,再将直流变为交流送至负载;当市电中断时,则由蓄电池组向逆变器送电以维持供电不间断。UPS 分为在线式和后备式两类,在线式 UPS 平常也工作在整流(充电)-逆变-输出方式下,仅在逆变器有故障时才通过转换开关改由市电直接向负载供电;而后备式 UPS 平常即工作在市电直接向负载供电的方式下。

电网络 electric network 由电子元件、真空或固态电子器件和传输线路连接组成的电路系统。网络的特性可用网络参量(如阻抗参量、导纳参量或散射参量等)来描述。网络可按不同方法分类:按组成网络的元件是集总参数元件还是分布参数元件网络可分为集总参数网络和分布参数网络;按网络中是否包含非线性元件、其输出波与输入波之间具有非线性还是线性关系网络可分为非线性网络和线性网络;按网络中是否有能量损耗网络可分为有耗网络和无耗网络;按网络中是否包含有源器件网络可分为有源网络和无源网络;按网络的特性是否与波的传输方向有关网络可分为非互易网络和互易网络;按网络与外电路连接端口的数目网络可分为单端口(二端)、双端口(四端)、三端口(六端)、四端口(八端)和多端口网络等。

网络分析 network analysis 根据已知的输入激励和网络组成计算网络响应特性的方法。网络分析的基本定律是基尔霍夫电压定律和基尔霍夫电流定律。网络分析包括对激励信号的研究和网络拓扑分析。对不同的激励源和网络具有不同的分析方法。

网络综合 network synthesis 根据给定的输入激励和输出响应来确定具体的网络结构和其中的元件值的方法。常用的二端网络的综

合法有：LC 网络福斯特(R.M.Foster)综合，LC、RC、RL 网络考尔(W.Cauer)综合，RLC 网络布隆纳(O.Brune)综合，布脱-都汶(R.Bott-R.J.Duffin)综合等；四端网络的综合常有：达林顿(S.Darlington)综合，零点位移法和链接法综合等。由于理想的网络函数往往不能实现，常采用逼近方法使频率函数或时间函数符合一定偏差要求并同时满足网络实现条件，例如，理想滤波器的衰减特性从通带到阻带应是突变的且在通带内衰减为零，但实际中只能用最大平坦函数或等波纹(切比雪夫)函数等来逼近，逼近计算则可借助计算机用迭代法或最优化方法来进行，这称之为计算机辅助网络设计。

回路分析法 loop method of analysis 它是根据基尔霍夫电压定律分析网络的一种基本方法。对于有 $N+1$ 个节点、B 条支路的网络，它应有 $B-N$ 个基本回路，设定回路电流 $I_1, I_2, \cdots\cdots, I_{B-N}$ 及其参考方向，列出回路电压方程—($B-N$)个线性联立方程，解方程即可求出各回路电流。

节点分析法 nodal method of analysis 它是根据基尔霍夫电流定律分析网络的一种基本方法。对于 $N+1$ 个节点的网络，选定某一节点为参考节点，以其余节点对参考节点的电压 $V_1, V_2, \cdots\cdots, V_N$ 为独立变量，对 N 个节点列出节点电流方程—— N 个线性联立方程，解方程即可求出各节电压，然后可求出支路电压和电流。

状态变量法 state variable technique 一个有因果关系的动态系统，即已知 $t=t_0$ 时系统的初始状态和 $t \geqslant t_0$ 时的输入，则其在 $t \geqslant t_0$ 时的系统状态和输出就完全被确定。这类问题的求解可以用状态变量法。其方法是：(1)首先选择状态变量—能完全描述系统状态的一组数量最少的变量；(2)列写出状态方程；(3)求解状态方程。状态变量法的主要优点是：它将过去状态直接由状态变量表示，从而将描述复杂系统的线性微分方程用一组一阶线性微分方程来表示，从而可供方便求解，并适合计算机求解。

信号流图 signal flow graph 求解由线性代数方程组表示的网络方程的一种图解法。求解时首先构成流图，它是将网络各输入、输出物理量分别用结点来表示，将各物理量之间的关系用从自变量结点指向应变量结点并附有一定系数的定向线段来表示，使线段的终点量等于所有指向它的起点量乘以相应系数之和。然后可按照一定的规则简化流图，使未知量结点和已知量结点之间有一条或几条系数已知的定向线段直接连结从而求出未知量；或者也可用一定的计算公式(如不接触环法则)直接求出未知量。信号流图法具有计算简便、概念直观等优点。

阻抗矩阵 impedance matrix 表征网络特性的参量之一，在 n 端口线性网络中，描述各端口电压与电流之间的关系为$[V]=[Z][I]$，其中

$$[Z]=\begin{bmatrix} Z_{11} & Z_{12} & \cdots\cdots & Z_{1n} \\ Z_{21} & Z_{22} & \cdots\cdots & Z_{2n} \\ Z_{n1} & Z_{n2} & \cdots\cdots & Z_{nn} \end{bmatrix}$$

称为阻抗矩阵，各矩阵元素 Z_{ij}称为阻抗参量，且有

$$Z_{jj}=\frac{V_j}{I_j}\bigg|_{\substack{I_i=0(i\neq j)\\ I_j\neq 0}}$$

$$Z_{ij}=\frac{V_i}{I_j}\bigg|_{\substack{I_i=0(i\neq j)\\ I_j\neq 0}}$$

Z_{jj}和 Z_{ij}分别表示除第 j 端口外其余端口全部开路时，第 j 端口的输入阻抗和第 j 端口到第 i 端口的转移阻抗。

导纳矩阵 admittance matrix 表征网络特性的参量之一，在 n 端口线性网络中，描述各端口电流与电压之间的关系为$[I]=[Y][V]$，其中

$$[Y]=\begin{bmatrix} Y_{11} & Y_{12} & \cdots\cdots & Y_{1n} \\ Y_{21} & Y_{22} & \cdots\cdots & Y_{2n} \\ Y_{n1} & Y_{n2} & \cdots\cdots & Y_{nn} \end{bmatrix}$$

称为导纳矩阵，各矩阵元素 Y_{ij}称为导纳参量，且有

$$Y_{jj}=\frac{I_j}{V_j}\bigg|_{\substack{V_i=0(i\neq j)\\ V_j\neq 0}}$$

$$Y_{ij}=\frac{I_i}{V_j}\bigg|_{\substack{V_i=0(i\neq j)\\ V_j\neq 0}}$$

Y_{jj}和 Y_{ij}分别表示除第 j 端口外其余端口全部短路时，第 j 端口的输入导纳和第 j 端口到第 i 端口的转移导纳。

散射矩阵 scattering matrix 表征网络特性的参量之一，在 n 端口线性网络中，描述各端口归一化入射电压波 a 与归一化反射电压波 b 之间的关系为$[b]=[S][a]$，其中

$$[S]=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots\cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots\cdots & S_{2n} \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots\cdots & S_{nn} \end{pmatrix}$$

称为散射矩阵，各矩阵元素 S_{ij}称为散射参量，其优点是在微波网络中便于测量，且有

$$S_{jj}=\frac{b_j}{a_j}\Big|_{\substack{a_i=0(i\neq j)\\ a_j\neq 0}}$$

$$S_{ij}=\frac{b_i}{a_j}\Big|_{\substack{a_i=0(i\neq j)\\ a_j\neq 0}}$$

S_{jj}和 S_{ij}分别表示除第 j 端口接信号源外其余端口全部接匹配负载时，第 j 端口的归一化电压反射系数和从第 j 端口到第 i 端口的归一化电压传输系数。

增益 gain 指电路的输出量与输入量之比，即放大倍数。如以电压（或电流）作为输出、输入量则得电压（或电流）增益；如以功率作为输出、输入量则得功率增益。为了计算方便通常将增益取对数，如电压增益

$$G_V=\ln\frac{U_1}{U_2}\qquad(\text{奈培})$$

或

$$G_V=20\log\frac{U_2}{U_1}\qquad(\text{分贝})$$

式中 U_1、U_2 分别为输入和输出电压，且有 1 奈培＝8.686 分贝。

分贝 decibel 表示某个器件或电路的放大或衰减的单位。它定义为

$$\text{分贝数}=10\lg\frac{\text{输出功率}}{\text{输入功率}}$$

$$=20\lg\frac{\text{输出电压(或电流)}}{\text{输入电压(或电流)}}$$

它与奈培之间的关系为：1 分贝（dB）＝0.115 奈培（Np）。

奈培 neper 它是以自然对数表示的某个器件或电路的放大或衰减的单位。它定义为

$$\text{奈培数}=\frac{1}{2}\ln\frac{\text{输出功率}}{\text{输入功率}}$$

$$=\ln\frac{\text{输出电压(或电流)}}{\text{输入电压(或电流)}}$$

它与分贝之间的关系为：1 奈培（Np）＝8.686 分贝（dB）。

电噪声 electric noise 指电子电路、器件和系统中任何不需要的无用电信号。电子系统的噪声来源有外部噪声和内部噪声，外部噪声主要有天线热噪声、大气噪声、宇宙噪声、工业噪声和其他电子设备的干扰等；内部噪声包括电阻热噪声、晶体管和电子管等器件的噪声等。一般情况下，噪声是有害的，它将限制接收机的灵敏度和降低通信的质量等，因此，研究噪声的来源、特性和设法降低它的影响具有重要意义。

噪声系数 noise figure 量度网络噪声性能的参数，它定义为网络输入端信噪比 S_i/N_i 与输出端信噪比 S_o/N_o的比值，即

$$F=\frac{S_i/N_i}{S_o/N_o}$$

它表示实际网络由于内部噪声的影响使其输出端比输入端的信噪比变坏的倍数。用分贝（dB）为单位表示为

$$F=10\lg\frac{S_i/N_i}{S_o/N_o}\quad(\text{dB})$$

为了使噪声系数与输入噪声无关，通常规定输入端处于 290K，即 $N_i=k290B_n$（k 为玻尔兹曼常数，B_n 为噪声带宽）。

噪声温度 noise temperature 它是将电子器件或网络内部产生的噪声等效为在相同频带内处于噪声温度 T 的电阻产生的热噪声，有

$$T=\frac{N}{kB_n}$$

式中 N 为资用噪声功率，k 为玻尔兹曼常数，B_n 为噪声带宽。

等效输入噪声温度 equivalent input noise temperature 量度网络噪声性能的一个等效参数，它将一个输入端在 0K 的实际网络的噪声功率输出 N_o 等效为一个输入端处在 T_e 的无噪声的理想网络的噪声功率输出，即

$$kT_eB_n = \frac{N_0}{G}$$

式中 k 为玻尔兹曼常数，B_n 为噪声带宽，G 为资用功率增益，T_e 就称为等效输入噪声温度。一个输入端处在 T_i 的网络的资用噪声功率为

$$N_{oi} = Gk(T_i + T_e)B_n$$

等效输入噪声温度 T_e 与噪声系数 F 的关系为

$$F = 1 + \frac{T_e}{290}$$

或

$$T_e = (F - 1)290$$

灵敏度 sensitivity 灵敏度是指接收机接收微弱信号的能力。它定义为当接收机正常工作(如达到一定的输出功率和信号噪声比)时输入端必需的信号强度或场强，信号强度以微伏计，场强以毫伏/米计。为了提高灵敏度应提高接收机的放大量，但这受到接收机内部噪声的限制，因为信号与噪声同时被放大仍不能满足信噪比的要求，因此为了进一步提高接收机灵敏度应设法降低其内部噪声和抑制天线上的外来噪声。

选择性 selectivity 选择性是指接收机选择有用信号、抑制干扰信号的能力。接收机的选择性是靠各级谐振回路来实现的。其选择性通常用对干扰的灵敏度 E_A 和对信号的灵敏度 E_{A0} 之比 E_A/E_{A0} 来评定，E_A/E_{A0} 随频率 f 的变化曲线称为选择性曲线，选择性曲线越尖锐，选择性就越好。

频率响应 frequency 电子元件、器件、电路和系统的特性参数随频率而变化的特性称为频率响应。通常可用频率响应特性曲线来表示。

传感器 transducer 一种能将被测对象的某种物理、化学、生物等信息转换成便于直接测量和处理的信息的器件。由于电信号便于处理，因此，传感器常又可定义为把各种外界信号转换成电信号的器件。它可将诸如压力、温度、湿度、气味、色泽、流量、转速、应变、振动振幅、射线以及人体的血压、呼吸流量、脉象、心磁、肺磁等非电量转换成电信号后进行测量和显示。传感器广泛应用于工业计量、测量、自动控制、环保、防灾报警、医疗保健和交通运输等领域。

自动控制 automatic control 采用自动化装置对控制信号进行自动测量、变换、处理，并用来控制被控对象达到预定的工作状态或完成预定的功能。自动控制的基本内容包括：(1)自动控制理论——控制论。现代控制论主要包括：①系统运动状态的描述；②系统稳定性分析；③系统辨识；④最优控制；⑤自适应控制。(2)自动控制技术和工具，一般有机械、气动、液压和电子式等多种型式。自动控制技术广泛应用于工业生产和国防等。自动控制系统按被控制量的变化规律可分为恒定控制系统、程序控制系统和随动系统。

记录仪 recorder 记录一个或多个变量随另一个变量或时间变化的过程的仪器。它能自动记录周期性或非周期性信号的缓慢变化过程，以供分析处理。它可记录模拟信号或数字信号。

记录仪的主要指标有：工作频率、输入信号动态范围、分辨率、记录线性度和响应时间等。

示波器 oscilloscope 用阴极射线示波管以图像形式显示电信号随时间变化波形的电子测量仪器。它具有分析波形直观、量程大、响应快、输入阻抗高(对被测系统影响小)和多信道等特点，是一种用途最广泛的电子测量仪器，它不但用于电信号的时域测量和分析，且通过适当的传感器可将几乎一切物理量转换成电信号进行显示和测量。

示波器按测量的时间关系可分为通用示波器、记忆示波器和取样示波器。通用示波器用于观察分析一般的周期性电信号；记忆示波器用于观察单次瞬变、非周期或低重复频率的电信号，其记忆方法可采用记忆示波管或采用取样技术、数字技术和存储器；取样示波器用于观察频率可高达 18GHz 的周期信号，它采用取样技术对每个周期的信号逐次取样，构成一个与被测高频波形相似的低频包络波形，从而可用普通示波器显示。

示波器的主要指标有：频率范围(−3dB 时的上、下限频率)、灵敏度(偏转 1 格刻度所需的输入电压)、信道数目(同时显示的信号路数)和存储功能等。

频谱分析仪 spectrum analyzer 能以模拟方式或数字方式显示电信号频谱结构的仪器。它分析的频谱范围可从 1Hz 以下直到高达亚毫米波段,可用于测量信号的谱纯度、失真度、调制度和频率稳定度等参数。

频谱分析仪可分为实时式和扫频式两类,前者能在被测信号发生的实际时间内取得所需的全部频谱信息并进行分析和显示结果,主要用于持续时间很短的随机过程的频谱分析;后者是具有显示装置的扫频外差接收机,主要用于连续信号和周期信号的频谱分析。

频谱分析仪的主要指标有:频率范围、分辨力、分析谱宽、分析时间、扫频速度、灵敏度、显示方式和假响应等。

网络分析仪 network analyzer 测量网络复数散射参量(S_{11}、S_{12}、S_{21}、S_{22})的一种仪器,并以扫频方式给出各散射参量的幅度、相位的频率特性。在超高频波段的网络分析仪常配以电子计算机而构成自动网络分析仪,能对测量结果逐点进行误差修正,并换算出其他各种网络参量和性能参数,如 Z、Y、h 参量及输入、输出反射系数、驻波比、损耗或增益、相移和时延以及阻抗特性等。

扫频信号发生器 sweep signal generator 信号发生器的一种,它所产生的信号频率能随时间作线性变化,而幅度则基本恒定。扫频信号发生器广泛应用于频谱分析仪、跟踪接收机和系统频率响应特性的测量中。

产生扫频信号的方法可分为模拟扫频和合成扫频。模拟扫频常用电调谐或磁调谐,返波管振荡器、电调磁控管振荡器和变容二极管调谐晶体管振荡器等为电调谐;YIG 调谐振荡器为磁调谐。合成扫频则采用频率合成技术(谐波混频器扩频或锁相环扩频)与模拟扫频技术相结合得到高稳定度、高准确度和低相位噪声的扫频信号。

脉冲信号发生器 pulse signal generator 通常指产生矩形窄脉冲信号的信号发生器,其信号的脉冲幅度、宽度和重复频率是可调的并指示。它广泛用于测试和校正各种脉冲和宽带设备或作为其他信号源的调制器。脉冲信号发生器由主控振荡器、延迟级、脉冲形成级、输出级和衰减器等部分组成。

谐波分析 harmonic analysis 任何周期性振荡波形都可分解为一个基波和若干个谐波的正弦振荡的合成。它可展开为傅里叶级数:

$$f(t)=\sum_{n=0}^{\infty}(A_n\sin n\omega_1 t+B_n\cos n\omega_1 t)$$

式中系数 A_n 和 B_n 决定于 $f(t)$:

$$A_n=\frac{2}{T}\int_{t_1}^{t_1+t}f(t)\sin n\omega_1 t\,\mathrm{d}t$$

$$B_0=\frac{1}{T}\int_{t_1}^{t_1+t}f(t)\,\mathrm{d}t \qquad n=0$$

$$B_n=\frac{2}{T}\int_{t_1}^{t_1+t}f(t)\cos n\omega_1 t\,\mathrm{d}t \qquad n\neq 0$$

这种求得它们的振幅和相位的分析就称为谐波分析,也称为傅里叶分析。

傅里叶变换 Fourier transform 傅里叶变换是将时间连续函数变换为频率函数,即有:

$$F(\mathrm{j}\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}f(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega t}\mathrm{d}t$$

傅里叶反变换是将频率函数变换为时间函数,即有:

$$f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}F(\mathrm{j}\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega t}\mathrm{d}\omega$$

式中 $j=\sqrt{-1}$。利用傅里叶变换可对时域函数作频谱分析。

快速傅里叶变换 fast Fourier transform 它是计算离散傅里叶变换的一种快速算法。离散傅里叶变换的正变换和反变换公式分别为:

$$F_n=F(n)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}f_k\mathrm{e}^{-\mathrm{j}2\pi nk/N}$$

$$n=0,1,2,\cdots,N-1$$

$$f_k=f(k)=\sum_{n=0}^{N-1}F_n\mathrm{e}^{\mathrm{j}2\pi nk/N}$$

$$k=0,1,2,\cdots,N-1$$

可见为了计算全部 F_n(或 f_k)需作 N^2 次复数乘法和 $N(N-1)$ 次加法,为了减小计算量和提高计算速度,1965 年由库利-图基(Cooley-Tukey)提出 FFT 算法,可将计算量减小为 $\frac{N}{2}\log_2 N$ 次复数乘法和 $N\log_2 N$ 次复数加法,从而大大提高了计算效率使离散傅里叶变换广泛获得实际应用。

拉普拉斯变换 Laplace transform 拉普拉

斯变换是将时间连续函数变换为复频率函数，即有

$$F(p)=\int_0^{\infty}f(t)e^{-pt}dt$$

拉普拉斯反变换是将复频域函数变换为时间函数，即有：

$$f(t)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}F(p)e^{pt}dp$$

式中 $p=\sigma+j\omega$ 称为复频率，σ 表征振幅的变化，ω 为角频率。在分析连续时间系统时，利用拉普拉斯变换可将微积分方程转化为代数方程方便求解。

Z 变换 Z transform Z 变换是离散序列在时间域和 Z 域间的线性变换，其正、反变换关系式分别为

$$X(z)=\sum_{n=0}^{\infty}x(n)z^{-n}$$

$$x(n)=\frac{1}{2\pi j}\oint_c X(z)z^{n-1}dz$$

式中 $Z=e^{st}$，$s=\sigma+j\omega$，在分析离散信号和系统时，利用 Z 变换可将线性差分方程转化为代数方程求解。

二、电磁场理论
Electromagnetic Field Theory

电磁波的极化 electromagnetic wave polarized 电磁波在传播时，若电场矢量的方向保持固定或按一定的规律旋转，这种电磁波称为极化波（或偏振波），电磁波按极化可分为线极化（又有水平极化和垂直极化）、圆极化和椭圆极化。

线极化 linear polarized 如果电磁波在传播中电场矢量的方向总保持在固定的一直线上变化，就称为线极化，也称平面极化。当电场矢量是垂直于地面时，称为垂直极化；当电场矢量是平行于地面时，称为水平极化。二个具有任意相对大小振幅、同相或反相的垂直和水平极化波可合成为一个任意方向的线极化波。

圆极化 circular polarized 如果在电磁波传播的每一周期内，电场矢量端点的轨迹在垂直于传播方向平面上的投影是一个圆时就称为圆极化。当顺着传播方向看，若电场矢量旋转方向是顺时针的（符合右手螺旋关系）称为右圆极化；若电场矢量旋转方向是逆时针的（符合左手螺旋关系）称为左圆极化。

一个圆极化波可以看作为二个振幅相等、相位相差 90°或 270°的水平极化波和垂直极化波的合成。

椭圆极化 elliptically polarized 如果在电磁波传播的每一周期内，电场矢量端点的轨迹在垂直于传播方向平面上的投影是一个椭圆时就称为椭圆极化。

一个椭圆极化波可以看作为二个振幅不同、且具有任意相位差的水平极化和垂直极化波的合成。

均匀介质 uniform medium 如果媒介质的电气参数（介电常数 ε、磁导率 μ）在介质中处处相同，即与位置无关，则称该介质为均匀介质，反之就称为非均匀介质。

线性介质 linear medium 如果媒介质的电气参数（介电常数 ε、磁导率 μ）与其中所传播的电磁波的场强无关，则称该介质为线性介质，反之就称为非线性介质。

无耗介质 lossless medium 如果媒介质的介电常数 ε 或磁导率 μ 是一个纯实数，电磁波在其中传播时就没有损耗，则称该介质为无耗介质，反之就称为有耗介质。

各向同性介质 isotropic medium 如果媒介质的电气参数（介电常数 ε 或磁导率 μ）与电场和磁场的取向无关，即 ε 和 μ 为一标量，则称该介质为各向同性介质。

各向异性介质 anisotropic medium 如果媒介质的电气参数（介电常数 ε 或磁导率 μ）与电场和磁场的取向有关，且在各个取向上不同，这时 ε 或 μ 为一张量，则称该介质为各向异性介质。

旋电介质 gyroelectric medium 具有旋电效应的介质，等离子体和铁电体是其典型。当在电磁波传播方向加一纵向恒定磁场时，它的介电常数是一个反对称张量，即有

$$\overleftrightarrow{\varepsilon}=\begin{pmatrix}\varepsilon & jk & 0\\ -jk & \varepsilon & 0\\ 0 & 0 & \varepsilon_{11}\end{pmatrix}$$

这时，交变电场强度的横向分量不仅引起与它平行的横向电位移矢量，而且还引起与它垂直的横向电位移矢量。

电磁波在旋电介质中具有极化面旋转效应。

旋磁介质 gyromagnetic medium 具有旋磁效应的介质，微波铁氧体是其典型。当在电磁波传播方向加一纵向恒定磁场时，它的导磁率是一个反对称张量，即有

$$\overleftrightarrow{\mu} = \begin{pmatrix} \mu & jk & 0 \\ -jk & \mu & 0 \\ 0 & 0 & \mu_{11} \end{pmatrix}$$

这时，交变磁场强度的横向分量不仅引起与它平行的横向磁感应强度，而且还引起与它垂直的横向磁感应强度。

电磁波在旋磁介质中具有极化面旋转（法拉第旋转）效应和双折射（科顿–冒顿）效应。

复介电常数 complex permittivity 当计及非理想媒介质的介质损耗时，媒质的介电常数 ε 可表示为一个复数 $\tilde{\varepsilon}$，称为复介电常数。其值为

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_0(\varepsilon' - j\varepsilon'') = \varepsilon_0\left(\varepsilon_r + \frac{\sigma}{j\omega\varepsilon_0}\right)$$

其实数部分 $\varepsilon_0\varepsilon'$，即为介电常数，其虚数部分 $\varepsilon_0\varepsilon''$表征了介质的损耗特性，$\varepsilon'' = \frac{\sigma}{\omega\varepsilon_0}$称为介质的损耗系数（$\sigma$ 为介质的电导率）。

介质损耗角正切 tangent of dielectric loss angle 描述介质损耗特性的一个材料参量。它是复介电常数的实部与虚部之比，其值为

$$\tan\delta = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'} = \frac{\sigma}{\omega\varepsilon}$$

它是介质材料在交变电场每周期中损耗的能量与最大储存能量之比。介质损耗的大小决定于材料的结构，并与电场的频率、温度等有关，通常频率越高，损耗越大。

电磁场的边值问题 boundary-value problem of electromagnetic field 求满足电磁场微分方程和给定的边界条件的电磁场解的问题。电磁场微分方程有：麦克斯韦场方程组、静态场的泊松或拉普拉斯方程、导波的亥姆霍兹方程等。场的边界条件为：在两种媒质分界面上，切向电场强度连续，切向磁场强度之差等于面传导电流密度 $\boldsymbol{J}_s$，法向电位移矢量之差等于面自由电荷密度 σ，法向磁感应强度连续；在理想导体表面上的边界条件为切向电场和法向磁感应为零，切向磁场等于面传导电流密度，法向电位移等于面自由电荷密度。常用的电磁场边值问题的求解方法有：分离变量法、复变函数法、保角变换法和数值计算法等。

电磁场的本征函数和本征值 eigen-function and eigen-value of electromagnetic field 求解导波问题时，需求满足给定边界条件的亥姆霍兹方程

$$\nabla_T^2\boldsymbol{E} + k_c^2\boldsymbol{E} = 0$$

$$\nabla_T^2\boldsymbol{H} + k_c^2\boldsymbol{H} = 0$$

的解，式中 $k_c = \omega^2\varepsilon\mu + \gamma^2$，$k_c$ 称为截止波数，γ 为传播常数，这时方程中的截止波数 k_c 只能取某些确定的值，称为本征值，对应于每一个本征值可以求出满足场方程和边界条件的场函数，称为本征函数。

电磁场的惟一性定理 uniqueness theorem of electromagnetic field 它是指对于一个被封闭曲面包围的无源场域，如果曲面上各点的电磁场的边界条件（如电场的切向分量或磁场的切向分量）已给定，则该场域中的电磁场分布就是惟一的。

电磁场的等效源原理 equivalent source principle of electromagnetic field 若封闭曲面 $\boldsymbol{S}$ 包围场源，并将空间分为内、外两区域，则外区的场可认为是由 $\boldsymbol{S}$ 表面等效源所产生，其等效面电流密度 $\boldsymbol{J}_s$ 和等效面磁流密度 $\boldsymbol{J}_m$ 为

$$\boldsymbol{J}_s = \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{H}_s$$

$$\boldsymbol{J}_m = \boldsymbol{E}_s \times \boldsymbol{n}$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 为 $\boldsymbol{S}$ 的单位外法向矢量，$\boldsymbol{H}_s$、$\boldsymbol{E}_s$ 为 $\boldsymbol{S}$ 面上原有的切向场。利用等效源原理可将实际源激励的电磁场的边值问题转换为等效面源的辐射问题，它常用于电磁耦合和绕射问题的求解。

电磁场的对偶原理 duality principle of electromagnetic field 为了求解电磁场问题的方便，可引入等效磁流密度 $\boldsymbol{J}_m$ 和等效磁荷密度 ρ_m，其值为 $\boldsymbol{J}_m = \boldsymbol{H} \times \boldsymbol{n}$，$\rho_m = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{B}$，（$\boldsymbol{n}$ 为指向等效区的单位法向矢量），这时简谐电磁场的

麦克斯韦方程组变为广义形式

$$\begin{cases} \nabla \times \boldsymbol{E} = -\mathrm{j}\omega\mu \boldsymbol{H} - \boldsymbol{J}_{\mathrm{m}} \\ \nabla \times \boldsymbol{H} = \mathrm{j}\omega\varepsilon \boldsymbol{E} + \boldsymbol{J} \\ \nabla \cdot \boldsymbol{E} = \rho / \varepsilon \\ \nabla \cdot \boldsymbol{H} = \rho_{\mathrm{m}} / \mu \end{cases}$$

其中电场量($\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{J}$、ρ、ε)和磁场量($\boldsymbol{H}$、$\boldsymbol{J}_{\mathrm{m}}$、$\rho_{\mathrm{m}}$、$\mu$)之间具有对偶性,也就是说,当进行下列代换后

$$\boldsymbol{E} \to \pm \boldsymbol{H} \quad \boldsymbol{H} \to \mp \boldsymbol{E} \quad \boldsymbol{J}_{\mathrm{m}} \to \pm \boldsymbol{J} \quad \boldsymbol{J} \to \boldsymbol{J}_{\mathrm{m}}$$

$$\rho \to \pm \rho_{\mathrm{m}} \quad \rho_{\mathrm{m}} \to \mp \rho \quad \varepsilon \to \mu \quad \mu \to \varepsilon$$

场方程组不变,这就是电磁场的对偶性原理,利用这原理可以由已知的一种电磁场问题(如源 $\boldsymbol{J}$、ρ 激励)的解通过代换直接得到其对偶问题(如源 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{m}}$、$\rho_{\mathrm{m}}$ 激励)的解。

微扰法 perturbational method 它是求解相对于某个初始系统具有一微小改变的系统的电磁场本征值的一种近似方法。它将待求系统看作为由某个较简单的初始系统的某个参量发生微小改变所形成的微扰系统,那么只要初始系统的本征值和场分布是已知的,则就可以利用微扰公式并将其中微扰系统的场以初始系统的场或与之相关的场来近似,从而求出待求系统本征值的近似值。它常用于求解填充介质或边界形状有微小改变时波导的传播常数 γ 或谐振腔的谐振频率 ω_0 的近似值。

变分法 variational method 它是将电磁场微分方程的求解化为一个泛函求极值问题的近似解法。它利用变分稳定公式,使可以由系统较粗糙的近似场解来求出系统本征值的较精确的近似解。其求解的基本步骤为:(1)建立稳定公式:即系统本征值依赖于本征函数的泛函关系式;(2)确定满足泛函极值条件的近似本征函数;(3)由稳定公式计算出近似本征值。

电磁场的有限差分法 finite difference method of electromagnetic field 电磁场边值问题的一种数值解法。它首先把场域分割成许多规则网格,然后通过用各离散的网格节点上待求函数的差商来近似代替微商,将场的微分方程结合具体边界条件化为一组只含各节点未知场函数的差分方程组,从而以解该代数方程组所得的各离散点上场函数的数值解来近似原边值问题的连续场函数解析解。

电磁场的有限单元法 finite element method of electromagnetic field 电磁场边值问题的一种数值解法。它首先把求解电磁场微分方程的问题化为等价的泛函求极值的变分问题,然后将定解区域剖分为有限个单元,这样就把变分问题近似化为有限元子空间中以各单元节点上场函数表示的多元函数的求极值问题,得到有限元方程组,从而以解该代数方程组所得的各离散点上场函数的数值解来近似原边值问题的连续场函数解析解。

电磁场的矩量法 moment method of electromagnetic field 一种将连续的微分或积分方程离散化为代数方程的电磁场数值解法,特别广泛应用于积分方程的求解。它首先将待求场的微分或积分方程写成带有微分或积分算符的算子方程,再将待求场函数展开为某一组选用的基函数的线性组合代入方程,然后用一组选定的权函数分别对所得方程取内积(矩量),从而得到一个矩阵方程或代数方程组,进而解该方程得到展开基函数的各系数,从而得到待求场函数的近似解。它能够解决一些边界比较复杂的电磁问题,特别广泛应用于天线分析和电磁散射问题的求解。

电磁场的边界元法 boundary element method of electromagnetic field 把边界积分法和有限单元法的离散方式相结合而形成的一种电磁场数值解法。它首先利用加权余量法将待求场的微分方程化为边界上的积分方程,然后通过将边界剖分为有限个单元,把边界上各点场函数表示为各节点函数的插值,从而将积分方程化为各节点函数的代数方程组,从而求出微分方程的近似数值解。这种解法的优点是由于用了边界积分方程使求解场问题的维数减少(如三维变二维),导致代数方程元数大为减少,计算简单;而且它可不通过电位而直接求解电场。

三、微波理论与技术
Microwave Theory and Techniques

微波 microwave　波长为1米～0.1毫米(频率为300兆赫～3000吉赫)的电磁波,通常它又分为分米波(1～10分米)、厘米波(1～10厘米)、毫米波(1～10毫米)和亚毫米波(0.1～1毫米)。微波具有以下主要特点:(1)占有很宽的频宽;(2)波长很短,具有类光特性,适用于无线电定位;(3)频率很高,适用于宽带技术;(4)它是地球的电磁频谱“宇宙窗口”,适用于卫星通信、宇宙通信等;(5)它的量子能量(10^{-3}～10^{-6}电子伏)与某些物质的能级差相当,其共振吸收和受激辐射是微波波谱学和量子无线电的发展基础;(6)它能穿透介质内部并与之相互作用,适用于微波加热、探测等;(7)它的振荡、传输、测量和电路等理论与技术都不同于低频无线电,已形成一门独立的科学技术。微波广泛应用于通信、雷达、导航、遥感与全息术、微波波谱学、微波等离子体、微波加热、医疗和诊断、射电天文和无线电气象学等领域。

毫米波与亚毫米波 millimeter wave and submillimeter wave　波长分别为1毫米～10毫米和0.1毫米～1毫米的电磁波称为毫米波和亚毫米波。它们位于和微波与红外波相交叠的波长范围,因此兼有两种波的特点,毫米波和亚毫米波理论与技术是微波向高频的延伸和光波向低频的发展。与微波相比,它具有频谱范围宽、信息容量大、分辨率高、抗干扰性好、穿透等离子体能力强和多普勒频移大、测速灵敏度高等优点,因此,该波段的开拓和发展对于通信、雷达、制导、遥感、等离子体、波谱学和射电天文等都具有重要意义。

红外与远红外波 infrared and far infrared wave　波长介于可见光和微波之间的电磁波。一般把红外又分为近红外、中红外和远红外,其波长范围分别为:0.75～2.5微米、2.5～25微米、25微米～1毫米(划分界限尚无定论)。红外波也是由物质内部运动的变化(如分子、离子、原子的振动、转动或电子跃迁)而辐射的电磁波。凡是温度高于0K的物体都能产生红外辐射,只是辐射的波长、强度和发射率等不同。红外线白天、黑夜都可利用,利用红外遥感可探测、识别目标,其分辨率比微波高,与可见光相比它不受天气影响。红外技术已广泛应用于目标探测、制导、夜视、遥感、医用热成像、测温、加热干燥和天文观测等。

横电磁波(TEM波) transverse electromagnetic wave　指电场和磁场沿传播方向的纵向分量都为零而只有横向分量的电磁波,常写为TEM波,它在无限大媒质、双线传输线、同轴线和带状线中传输,它是一种非色散波,其传输特性与频率无关。

横电波(TE波) transverse electric wave　指电场沿传播方向的纵向分量为零而只有横向分量,但磁场的纵向分量不为零的电磁波,常写为TE波,它在金属波导和介质波导中传输,它是一种色散波,其传输特性与频率有关。

横磁波(TM波) transverse magnetic wave　指磁场沿传播方向的纵向分量为零而只有横向分量,但电场的纵向分量不为零的电磁波,常写为TM波,它在金属波导和介质波导中传输,它是一种色散波,其传输特性与频率有关。

传输线 transmission line　广义而言,凡是能够传送电磁信号和能量的导波系统都可称为传输线,在微波技术中,传输线通常用来特指以TEM波工作的传输线,它包括平行双线、同轴线、带状线,以及以准TEM波工作的微带线等。对传输线的基本要求有:(1)传输损耗小、效率高;(2)工作频带宽,以保证信号无畸变;(3)功率容量大;(4)驻波比小;(5)物理、机械性能好,工作稳定可靠,不受外界影响。

同轴线 coaxial line　它是由二根同轴的圆柱导体所组成的传输线,它既是一种双导体传输线,可传输TEM波,又是一种同轴圆柱波导,可传输TE波和TM波,TEM波为基模,TE和TM波为高次模。同轴线以TEM波工作,具有宽频带特性,可用于从直流直至毫米波段。

同轴线有硬同轴线和软同轴线(同轴电缆)两种结构。硬同轴线内外导体间一般为空气,

其间每隔一段距离以介质环等支撑;软同轴线内导体为单根或多股绞合铜线,外导体由铜丝编织而成,其间填充高频介质。

为了保证同轴线单模工作,要求最低工作波长满足条件

$$\lambda_{min} \geqslant 1.1\pi(a+b)$$

式中 a、b 分别为同轴线的内径和外径。

波导 waveguide 广义而言,波导是指能够引导电磁波沿一定方向传送的传输系统,它包括所有的微波传输线。在微波技术中,波导通常特指以 TE 波或(和)TM 波工作的空心金属波导和以表面波工作的介质波导。波导不同于 TEM 波传输线的主要特性有:(1)色散,波的传输特性如导波波长、相速等与工作频率有关;(2)截止,当工作频率低于截止频率时波被截止而不能传输。

微带 microstrip 一种微波集成电路传输线,它由介质基片上的金属导带和底面的导体接地板构成。在工作频率较低时,它工作于准 TEM 波,近似为 TEM 波传输线。当工作频率较高时,则需考虑色散和高次模的影响,为避免高次模,应选用较低介电常数的介质基片(如石英)或采用悬置微带。微带采用薄膜或厚膜技术制作,对基片介质的要求是介电常数高、微波损耗低、温度稳定性和热传导性好、光洁度高等,常用的有氧化铝陶瓷、蓝宝石、石英和金红石等。对导体材料的要求是导电率高、温度系数低、附着力强、便于沉积、刻蚀和焊接,常用的有银、铜、金和铬。微带按其结构形式可分为开式微带、屏蔽微带和悬置微带。微带的优点是体积小、重量轻、频带宽、可靠性高、成本低和便于集成,其缺点是损耗稍大和功率容量小。

表面波波导 surface waveguide 传输表面波的波导。表面波的特点是其电磁场分布主要集中在构成波导的介质内部及其表面附近的区域中,场在介质外随离开表面距离的增加而呈指数衰减。表面波波导的主要形式有:介质杆波导、介质薄膜波导、介质镜像波导和介质涂层单导线等。它主要应用于毫米波和亚毫米波波段。

光纤 optical fiber 传输光波的传输线。它由纤芯和包层二种介质组成,纤芯的折射率比包层的高,一般包层外还加一塑料保护套。光纤按组成成分可分为石英光纤、多组分光纤、塑料光纤和液芯光纤等;按横截面上折射率分布可分为突变光纤、渐变光纤和 W 型光纤;按传输模式可分为多模光纤和单模光纤。光纤的主要特性参数为衰减和带宽,其衰减主要来自散射损耗、吸收损耗和微弯损耗;其带宽主要受模间色散(只存在于多模光纤中)、材料色散和波导色散的限制。光纤的主要应用有光纤通信和构成各种光纤传感器用于非电量测量。

波阻抗 wave impedance 它定义为电磁波横向电场分量与横向磁场分量的比值。对于正交坐标系(u, v, z)有

$$Z = \frac{E_u}{H_v} = -\frac{E_v}{H_u}$$

无限大媒质中的平面电磁波的波阻抗 $\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}}$;波导中的 TE 波和 TM 波的波阻抗分别为

$$Z_{TE} = \frac{j\omega\mu}{\gamma}$$

$$Z_{TM} = \frac{\gamma}{j\omega\varepsilon}$$

式中 ε 为媒质的介电常数,μ 为媒质的磁导率,γ 为传播常数。

特性阻抗 characteristic impedance 传输线的特性阻抗 Z_0 定义为线上入射波电压 $U^+(z)$ 和入射波电流 $I^+(z)$的比值,即

$$Z_0 = \frac{U^+(z)}{I^+(z)}$$

特性阻抗 Z_0 与传输线分布参量 L_0、C_0、R_0、G_0 的关系为

$$Z_0 = \sqrt{\frac{R_0 + j\omega L_0}{G_0 + j\omega C_0}}$$

对于无耗传输线($R_0 = G_0 = 0$),$Z_0 = \sqrt{\frac{L_0}{C_0}}$,它仅决定于传输线的型式、尺寸和周围介质等固有特性,因此它是代表传输线特性的一个重要参数。

输入阻抗 input impedance 传输线上任意

一点的输入阻抗 Z_{in}定义为该点上的由入射波和反射波叠加而成的合成波的电压 $U(s)$和电流 $I(s)$的比值,即

$$Z_{in}=\frac{U(s)}{I(s)}$$

对于无耗传输线,有

$$Z_{in}=Z_0\frac{Z_L+\mathrm{j}Z_0\tan\beta s}{Z_0+\mathrm{j}Z_L\tan\beta s}$$

式中 Z_0 为传输线的特性阻抗,Z_L 为负载阻抗,β 为相移常数,s 为所求点距负载的距离。

一个电路的输入阻抗则表示电路输入端电压和电流的比值。不论是传输线还是电路,输入阻抗都表示了所求点向负载看去所呈现的阻抗。

传播常数 propagation constant 量度电磁波在传播过程中振幅衰减和相位变化特性的一个参量。传播常数 γ 通常由衰减常数 α 和相移常数 β 组成,即

$$\gamma=\alpha+\mathrm{j}\beta$$

传播常数 γ 与传输线分布参数的关系为

$$\gamma=\sqrt{(R_0+\mathrm{j}\omega L_0)(G_0+\mathrm{j}\omega C_0)}$$

衰减常数 attenuation constant 它表示电磁波在传播过程中每单位长度上的衰减,有

$$\alpha=\frac{A}{l}=\frac{1}{l}\ln\frac{U_i}{U_0}$$
$$=\frac{1}{l}\ln\frac{I_i}{I_0}$$
$$=\frac{1}{2l}\ln\frac{P_i}{P_0}\quad(\text{奈培 / 米})$$

式中 U_i、I_i和 P_i分别为长为 l 的传输线输入端的电压、电流和功率;U_0、I_0 和 P_0 分别为其输出端的电压、电流和功率。

相移常数 phase constant 它表示电磁波在传播过程中每单位长度上的相移,有

$$\beta=\frac{2\pi}{\lambda_g}$$

式中 λ_g为导波波长,即在同一瞬间,传输线上波的相位相差 2π 的两点之间的距离。

相速度 phase velocity 它表示某一频率的电磁波在传播过程中等相位点(波前)的传播速度,相速度 $V_p=\omega/\beta$,ω 为波的角频率,β 为相移常数。

在无限大媒质中或 TEM 传输线中,$V_p=1/\sqrt{\varepsilon\mu}$,即为无限大媒质中的光速,其中 ε 为媒质的介电常数,μ 为媒质的导磁率,可见这时 V_p 与频率无关,即无色散。

群速度 group velocity 对于包含许多频率成分的合成波,在色散情形下,各不同频率的波以各自的相速度传播,合成波能量亦即其波形包络线上等相位点的传播速度就称为群速度。群速度 V_g有

$$V_g=\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}\beta}$$

式中 β 为相移常数,ω 为角频率。对于非色散波 $V_g=V_p$,对于色散波 $V_g=V_c^2/V_p$(V_c 为无限大媒质中的光速)。

色散 dispersion 它表示电磁波的传播特性(如相速度、传播常数和导波波长等)随波的频率而变化的现象。

在波导中,TE 和 TM 波的相速度为

$$V_p=\frac{V_c}{\sqrt{1-\left(\frac{f_c}{f}\right)^2}}$$

式中 V_c 为无限大介质中的光速,f 为工作频率,f_c 为截止频率,可见 V_p 与频率有关,因此 TE 和 TM 波是色散波。

对于 TEM 波

$$V_p=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon\mu}}=\frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r}}$$

它与频率无关,因此 TEM 波是非色散波。

时延 delay 指电磁信号通过网络传播从输入端到输出端所需的时间。对于单频信号,用相时延 τ_p 表示

$$\tau_p=\frac{\varphi_{21}}{\omega}$$

对于具有一定频宽的群信号,其包络波的时延称为群时延 τ_g

$$\tau_g=\frac{\mathrm{d}\varphi_{21}}{\mathrm{d}\omega}$$

式中 φ_{21}为信号通过网络的相移,ω 为角频率。

截止波长 cutoff wavelength 指在波导中波能够传输和截止的分界波长,与截止波长 λ_c 相应的波的工作频率称为截止频率 f_c,两者关系为 $f_c=V_c/\lambda_c$(V_c 为无限大介质中的光速)。

只有波的介质波长小于截止波长($\lambda < \lambda_c$)或波的频率高于截止频率($f > f_c$)时波才能够传输，否则就截止。波导的截止波长与波导的型式、尺寸和波型有关。

导波波长 guide wave length 导行电磁波在传输线中相位相差 2π 的两点之间的距离称为导波波长 λ_g。它与相移常数 β 的关系为

$$\lambda_g = \frac{2\pi}{\beta}$$

在 TEM 波传输线中，$\lambda_g = \lambda_0/\sqrt{\varepsilon_r} = \lambda$，在 TE 或 TM 波传输线中，$\lambda_g = \lambda/\sqrt{1-(\lambda/\lambda_c)^2}$，$\lambda_0$ 为自由空间波长，λ 为介质波长，λ_c 为截止波长。

反射系数 reflection coefficient 它是传输线上波的反射情况的量度，传输线上某一点的反射系数定义为该点的反射波电压 $U^-(z)$(电流 $I^-(z)$)与入射波电压 $U^+(z)$(电流 $I^+(z)$)的比值，即

$$\Gamma_V(z) = \frac{U^-(z)}{U^+(z)} \quad \Gamma_I = \frac{I^-(z)}{I^+(z)}$$

Γ_V 称为电压反射系数，Γ_I 称为电流反射系数，因为 $\Gamma_I(z) = -\Gamma_V(z)$，两者大小相等、相位相反，通常就称电压反射系数 Γ_V 为反射系数。

反射系数 Γ 与驻波比 ρ 的关系为

$$|\Gamma| = \frac{\rho - 1}{\rho + 1}$$

$$\varphi_L = 2\beta d_{\min} + \pi$$

式中 $|\Gamma|$、φ_L 分别为 Γ 的模和相角，β 为相移常数，$d_{\min}$为距负载最近的驻波电压节点距负载的距离。

驻波比 standing-wave ratio 它定义为传输线上驻波电压(电流)最大值与最小值的比值，即

$$\rho = \frac{|U|_{\max}}{|U|_{\min}} = \frac{|I|_{\max}}{|I|_{\min}}$$

它表示了传输线上波的反射情况。当 $\rho = 1$ 时，则无反射，线上传输行波，ρ 越大，则反射越严重。

驻波比 ρ 与反射系数 Γ 的关系为

$$\rho = \frac{1 + |\Gamma|}{1 - |\Gamma|}$$

行波 travelling wave 当传输线上没有反射波而只存在向一个方向传播的入射波时，这种波就称为行波。当传输线的负载阻抗 Z_L 等于其特性阻抗 Z_0 时，线上就传输行波。

无耗线上行波的特点有：(1)沿线各点的电压和电流的振幅不变；(2)沿线各点的输入阻抗处处等于特性阻抗；(3)线上任一点的电压和电流相位相同；(4)线上各点的传输功率相等，全部入射功率都被负载吸收。

驻波 standing wave 当传输线上负载为短路、开路或接纯电抗性负载时便产生全反射(反射系数的模为 1)，线上的合成波是入射波和反射波的叠加，这种波就称为驻波。

驻波的特点有：(1)线上电压、电流的振幅随位置呈周期性变化，但具有固定不变的节点(最小点)和腹点(最大点)，节点振幅为零，腹点振幅为入射波振幅的二倍，且相邻节(腹)点之间的距离等于导波波长之一半；(2)线上电压与电流随时间或位置都有 $\pi/2$ 的相位差；(3)传输线的输入阻抗为纯电抗，且随频率和线长变化，当频率一定时，它随线长变化分别相当于电感、电容、串联谐振和并联谐振；(4)传输线不能传输功率，负载不吸收功率，在 $\lambda_g/4$线长范围内电磁场总能量为常数。

在实际问题中，反射系数 $|\Gamma|$ 在 0 和 1 之间，所以线上传输的是行波和驻波的叠加，称为行驻波或混合波。

模式 mode 波导或谐振腔中可以存在有多种不同电磁场结构的波，对应于某种特定的电磁场分布的波称为模式或波型。不同的模式具有不同的截止波长或谐振波长，其中截止波长或谐振波长最长的波称为主模，其余的则称为高次模。

简并模 degenerative mode 在波导或谐振腔中，具有相同截止波长或谐振波长，但却具有不同电磁场分布的几种模式称为简并模。由于简并模具有相同的传输或谐振特性，所以相互之间易于发生转换和干扰，所以当以其一作为工作模式时通常需采取措施抑制它的简并模。

测量线 slotted line 用于测量微波波段电压驻波沿传输线分布的仪器。它由开槽线段、检测探头、传动机构和位置测量装置等组成，

通过在开槽线段中移动探针检取不同位置上的入射波和反射波的合成电压,确定沿传输线的驻波分布,从而可计算出驻波比、导波波长、阻抗、反射系数和散射系数等,它是最基本的微波测量仪器,通常有波导测量线、同轴测量线、自动测量线和扫频测量线等型式。

波长计 wavemeter 测量传输线中电磁波波长(自由空间波长)的装置,它通常利用谐振腔的谐振特性来实现。按所用谐振腔的型式波长计可分为同轴波长计和空腔波长计;按工作方式可分为通过型和反应型波长计。

匹配负载 matched load 用来全部吸收传输线高频功率的终端负载,通常要求其驻波比不大于1.05。匹配负载按其承受功率可分为高功率和低功率两种,高功率匹配负载常采用水、石墨粉和水泥混合物或碳化硅为吸收物质;低功率匹配负载常采用羰基铁粉为吸收物质。吸收物质常做成渐变斜面并需一定长度以改善匹配。

阻抗圆图 impedance chart 计算均匀传输线问题的一种曲线坐标图。它由一组归一化阻抗的实部和虚部的等值曲线簇和一组反射系数模值和幅角的等值曲线簇组成,根据关系 $\mathcal{Z}=\dfrac{1+\Gamma}{1-\Gamma}$ 或 $\Gamma=\dfrac{\mathcal{Z}-1}{\mathcal{Z}+1}$ 将两组曲线叠画在一起。利用圆图可以方便地对传输线的阻抗和反射系数进行换算,了解阻抗及反射系数沿传输线的分布,确定波腹、波节的位置以及求解阻抗匹配问题等,用途十分广泛。

阻抗匹配 impedance matching 它是指信号传输过程中信号源、传输线和负载之间的阻抗配合关系。有三种匹配关系:(1)信号源匹配:传输线的特性阻抗等于信号源内阻抗($Z_0=Z_g$),这时传输线输入端对信号源无反射,信号源对传输线上负载的反射无二次反射;(2)负载匹配:负载阻抗等于传输线的特性阻抗($Z_0=Z_L$),这时负载无反射,传输线工作于行波状态,负载吸收全部功率;(3)共轭匹配:传输线的输入阻抗等于信号源内阻抗的共轭值($Z_{in}=Z_g^*$),这时信号源输出最大功率。

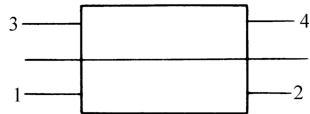
阻抗变换器 impedance transformer 将输出端的负载阻抗变换为所需的输入端阻抗的一种装置,常用于实现负载与传输线或两段不同特性阻抗传输线之间的匹配。

最简单的阻抗变换器是四分之一波长阻抗变换器,其长度 $L=\lambda_g/4$,特性阻抗 $Z_{01}=\sqrt{Z_1Z_2}$(Z_1 和 Z_2 分别为入端和出端阻抗)。为了扩展阻抗变换器的带宽,常采用多级阶梯阻抗变换器或渐变式阻抗变换器,阶梯阻抗变换器按其频率特性可分为二项式(最大平滑式)或切比雪夫式(等波纹式)阶梯阻抗变换器;渐变式阻抗变换器按其特性阻抗渐变形式可分为直线式、指数式和抛物线式等。

功率分配器 power divider 将一路输入信号分成几路输出信号的微波元件。按传输线型式功率分配器可分为波导、同轴线和微带型等;它们的结构型式有分支接头、定向耦合器、裂缝电桥和环形电桥等;按性能可分为固定的、可调的、等分的或不等分的等。

功率分配器的主要指标有:驻波比、隔离度、频带宽度和功率容量等。

定向耦合器 directional coupler 具有定向耦合作用的一种微波器件,它由主线(1、2)和副线(3、4)两段传输线段构成,其间通过耦合机构(如小孔、隙缝等)实现单方向的能量耦合,即臂1的输入信号除主线臂2输出外还定向耦合至副线臂4,而臂3无输出(如图)。

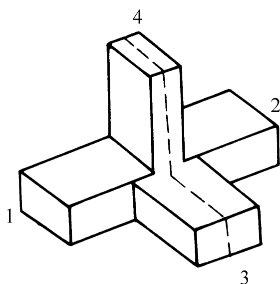


定向耦合器有波导、同轴线、带状线和微带线等多种结构型式。

定向耦合器的主要指标有:耦合度(或称过渡衰减)、方向性、输入驻波比和频带宽度等。

双T和魔T double T and magic T 双T由矩形波导E－T和H－T接头组合而成,它有一个对称面(如图),其中分支在宽壁上的(因其处在电场平面内)称为E－T,分支在窄壁上的(因其处在磁场平面内)称为H－T。在双T中,由3臂输入的信号至1、2臂平分同相输出,4臂无输出;由4臂输入的信号至1、2臂平分反相输出,3臂无输出,即3、4臂相互隔离,

1、2 臂对称。



如果在双 T 中加入对称调配元件使 3、4 臂同时匹配，则构成匹配双 T，也称为魔 T。魔 T 具有下列特性：(1)各臂完全匹配；(2)1、2 臂间，3、4 臂间彼此隔离；(3)3 臂的输入由 1、2 臂平分同相输出，4 臂的输入由 1、2 臂平分反相输出；(4)1 臂的输入由 3、4 臂平分同相输出，2 臂的输入由 3、4 臂平分反相输出。

衰减器 attenuator 用来衰减传输信号能量的元件。衰减器按传输线型式可分为波导式、同轴线式和微带线式；按衰减量的变化可分为固定式和可变式；按工作原理可分为吸收式、回转式、截止式和电调式等。

衰减器的主要指标有：输入、输出端驻波比、标准衰减量及精确度、衰减量变化范围和频带宽度等。

相移器 phase shifter 用来改变微波电路中传输波相位的元件。实现相位改变的方法有：在波导中置入介质片并改变其位置(介质相移器)；改变波导宽边尺寸(压缩波导相移器)；在波导中置入铁氧体并改变其磁化特性(铁氧体相移器)；用变容二极管或 PIN 二极管并改变其偏置电压(变容二极管相移器或 PIN 二极管相移器)。

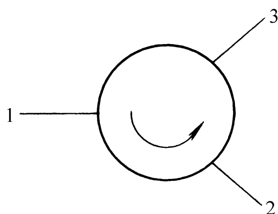
相移器的主要指标有：相移变化范围及精确度、插入损耗、频带宽度和功率容量等。

限幅器 limiter 用来将电路中的传输功率限制在一定电平上的元件。通常利用 PIN 二极管阻抗随偏置电压而变化的特性或微波铁氧体的铁磁共振的高功率效应，使在大功率输入时能将过大的功率吸收掉从而达到限幅的目的。

隔离器 isolator 一种非互易的微波铁氧体单向传输器件。它只允许沿一个方向传输的波顺利通过，而对相反方向传输的波则有很大的衰减。按照其工作原理铁氧体隔离器可分为谐振吸收式、场移式和法拉第旋转式等。

隔离器的主要指标有：正向损耗、反向隔离、输入、输出端驻波比和频带宽度等。

环行器 circulator 一种非互易的三端口微波铁氧体器件。它具有信号顺序传输的特性，即从任一端口输入的信号只能按给定顺序依次传输到下一端口输出。如图的环行器的传输顺序为 1—2—3—1。



环行器的主要指标有：正向损耗、隔离损耗、输入驻波比、频带宽度和功率容量等。

微波谐振腔 microwave cavity 用于微波波段的谐振电路，它通常由封闭的金属空腔构成。由于电磁场集中于腔内，无辐射损耗，故它有较高的品质因数 Q 值。

微波谐振腔有传输线型和非传输线型两大类。传输线型谐振腔由一段两端短路(或一端短路、一端开路)的传输线段构成，常见的有：波导腔(有矩形和圆柱形等)、同轴腔(有 $\lambda_g/2$、$\lambda_g/4$ 和电容加载三种型式)和微带腔(有 $\lambda_g/2$、$\lambda_g/4$、圆盘形和圆环形等型式)；非传输线型谐振腔不是由一段传输线段构成，其形状较复杂，最常见的有：重入式谐振腔和孔槽形谐振腔等。

谐振腔的主要指标有：谐振波长 λ_0 或谐振频率 f_0、品质因数 Q 和等效电导 G 等。

介质谐振腔 dielectric cavity 由一个低损耗、高介电常数的介质物体构成的谐振腔。由于电磁场在介质外区域随距表面距离的增加而急剧衰减的特性，使电磁能量局限在介质内

而构成谐振腔。它具有体积小、Q值高、温度稳定性好以及便于集成等优点，特别适用于毫米波和亚毫米波波段。

介质谐振腔按外形可有角柱形、圆柱形、圆环形和球形等。

微波集成电路 microwave integrated circuit 指工作在微波频段的集成电路。分为混合微波集成电路和单片微波集成电路，混合微波集成电路是在介质(高氧化铝瓷、蓝宝石、石英和陶瓷等)基片上用薄膜或厚膜技术制作各种微波功能电路，然后再安装上分立有源器件，常用的有微波低噪声放大器、微带混频器等。单片微波集成电路是在砷化镓或其他半导体材料基片上制作有源器件和无源功能电路，常用的有单片微波集成低噪声放大器、单片微波功率放大器、单片微波压控振荡器和单片电视卫星接收机前端等。

微波固态信号发生器 microwave solid-state signal generator 利用微波半导体二极管或微波晶体管产生微波振荡的信号发生器。常用的半导体二极管为具有负阻特性的雪崩二极管和体效应(耿氏)二极管，当在雪崩二极管上加直流恒流源或在体效应二极管上加直流恒压源，并以一定方式与微波谐振腔耦合就可产生微波振荡。体效应振荡器最高频率可达100吉赫兹，输出功率为毫瓦级，可用作小功率源、混频器本振源和参量放大器泵源；雪崩管振荡器最高频率可达300吉赫，功率大于体效应振荡器，但其调幅调频噪声较大。微波晶体管振荡器常用微波场效应晶体管和微波双极晶体管，场效应晶体管的振荡频率可达毫米波段，输出功率远大于其他固态源。各种微波固态源都可与变容二极管或YIG单晶组成电调谐振荡器，YIG调谐振荡器的调谐范围可达几个倍频程。

微波功率合成 microwave power synthesis 为了提高微波固态振荡器的输出功率而采用将多个振荡源输出功率合成的技术。采用的主要方法有：(1)将多个振荡二极管安装在同一个微波谐振腔中，以实现各器件输出功率的合成；(2)将多个振荡器通过各种形式的外电路耦合进行功率合成。功率合成技术的关键是振荡的稳定性和干扰模式的抑制。

慢波结构 slow-wave structure 为了在行波型电子器件中加强运动电子与电磁场的相互作用，使电子流的能量更有效地转换成电磁波的高频能量，要求电子的行进速度接近电磁波的相速，即满足同步条件，为此必须减慢电磁波的相速，慢波结构就是实现这一目的的装置。常用的慢波结构有螺旋线。

速调管 klystron 利用周期性调制电子注速度来实现振荡或放大的一种微波电子管。它首先在输入腔中对电子注进行速度调制，经漂移后转变为密度调制，然后群聚的电子块与输出腔隙缝的微波场交换能量，电子将动能交给微波场，完成振荡或放大。

按电子注行进轨迹速调管可分为直射式和反射式两类。直射式速调管的电子注由电子枪发出后一直向前飞行直至被收集极接收，它有双腔和多腔等型式，双腔型有输入和输出两个腔，而多腔型则在输入腔和输出腔之间加入一个或多个中间腔构成级联形式，从而可提高其增益、效率和输出功率。直射式速调管可在连续波或脉冲波工作，可作为放大管或振荡管。反射式速调管只有一个谐振腔，其电子注发出后经加速、会聚后在腔隙由微波场作速度调制，漂移后被反射极排斥返回并群聚后再与隙缝微波场交换能量，它是一种小功率微波振荡管，具有结构简单、工作可靠、使用方便以及可进行机械或电子调谐(调节反射极电压)等优点。

磁控管 magnetron 一种用于产生大功率微波振荡的微波电子管，它是一种正交场器件，即其中的电子运动方向、直流径向电场和恒定轴向磁场三者相互垂直。磁控管具有功率大、效率高和成本低等特点。

早期的负阻磁控管和回旋磁控管已不再实用，现代应用的都为多腔磁控管，它由阴极、阳极和谐振系统、能量耦合输出装置、磁路和调谐装置五部分组成(固定频率的磁控管中无调谐装置)。磁控管的阳极谐振系统由沿着圆周排列的一组闭合谐振腔构成，常采用孔槽形或扇形异腔结构。磁控管通常工作于π模，即相邻两谐振腔腔口的微波电场相位相差180°。

按工作状态磁控管可分为脉冲磁控管和连续波磁控管，前者主要用于雷达，后者主要用于微波加热、微波理疗和电子对抗。按频率是否可调磁控管可分为固定频率和可变频率二类，可变频率磁控管频率的改变可采用机械调谐(有电容、电感、混合或耦合腔调谐等)或电压调谐(改变阳极电压)。

行波管 travelling wave tube 利用连续调制电子注速度来实现微波放大的微波电子管。它由电子枪、聚焦系统、慢波电路、能量输入、输出耦合器、衰减器和收集极等部分组成。在行波管中，电子枪发出的电子注由聚焦系统会聚、加速保持所需形状进入慢波电路，而待放大的微波信号由输入耦合装置耦合至慢波电路并沿线行进，只要使电子注的速度与波的相速同步，电子注在慢波线中首先受微波场速度调制并在行进中转变为密度调制形成群聚，且群聚中心落在微波减速场中，电子将动能转换为微波场能，从而使微波信号得到放大。

回旋管 gyrotron 产生大功率毫米波和亚毫米波的一种新型电真空器件。最简单的回旋管是单腔回旋管，它主要由电子枪、互作用腔、输出结构(包括收集极、输出腔)和磁场四部分组成，电子枪产生高能电子在磁场作用下高速回旋运动进入互作用腔，若使互作用腔的谐振频率与电子回旋频率满足关系：$\omega = n\omega_0$ ($n=1,2,3$)，电子回旋频率 $\omega_0 = eB_0/m\gamma$(e、m 分别为电子电荷和质量，B_0 为恒磁场磁感应强度，$\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2}$为相对论系数)电子将能量交给高频场，在腔中激励高频振荡并通过输出结构输出，电子则被收集极收集。

由于互作用腔由一段两端敞开的波导构成，没有慢波结构，且它可工作在高次模式上，所以回旋管摆脱了普通微波管在毫米波和亚毫米波段的限制。

微波测量 microwave measurement 对微波信号和微波电路的有关参数的测量技术。不同于低频无线电测量中主要测量电压、电流和电阻、电容、电感，微波测量的主要对象是功率、波长或频率、阻抗、场强、衰减、相移和介质材料参数(复介电常数 ε 和复磁导率 μ)。微波测量的常用检测仪器为检波器、功率计、场强计、测量线和网络分析仪等。

微波非电量测量 microwave measurement for non-electric quantity 利用微波对湿度、温度、厚度、距离、速度以及物质的材料参数(如介电常数 ε 和导磁系数 μ)等非电量进行测量。测量原理是利用微波传输中的衰减、反射、相移或谐振腔的谐振频率和品质因数等与这些参数有关的特性，通过测量某个微波参数从而换算出有关的非电参量。微波参数与非电量间的对应关系由预先作好的校正曲线或有关的理论公式描述。这种测量方法的优点是：快速、自动、准确、连续、非接触和非破坏性，且在生产过程中易于实现自动控制。它常用于测量粮食、木材、纸张和石油等的含水率，测量钢板的厚度、高炉料面的高度、某些悬浮液体的浓度等。

微波防护 microwave protection 微波辐射在人体内引起的热效应和非热生物效应会造成对人体的伤害，特别是对眼睛和睾丸的影响最为敏感。我国规定微波辐射的卫生标准为：一天 8 小时工作时＜50 微瓦/厘米^2；一天内的总剂量＜300 微瓦时/厘米^2；距离设备 5 厘米处的泄漏＜5 毫瓦/厘米^2；家用微波炉的泄漏＜1 毫瓦/厘米^2。为了防护微波泄露，对高功率微波设备应采用防止泄漏的装置或屏蔽装置；工作人员可穿戴金属丝网织品防护服和配戴防护眼镜。

四、无线电物理学
Radio Physics

无线电波传播 radio wave propagation 研究频率从几赫兹到 3000 吉赫兹的无线电波在地球(地下、水下和地球表面等)、地球大气层(对流层、电离层和磁层)和宇宙空间中传播过程的理论。电波在媒质或媒质分界面有吸收、反射、折射、散射、绕射等现象，使电波的特性参量(如幅度、相位、极化和传播方向等)发生变化，研究电波传播的物理机理、计算传播过程中特性参量的变化对于电子系统工程的设

计以及用电波来探测研究大气物理等具有重要意义。电波传播的研究方法主要有：理论研究、实验观测和计算机模拟等。

无线电遥控 radio remote control 对被控对象进行远距离控制，控制端利用无线电通信技术将控制指令传至被控对象，然后利用自动控制技术控制它完成控制端所要求的操作。

无线电遥测 radio telemetry 对被测对象的某些参数进行远距离测量，其过程是：首先由传感器自动测出被测对象的某些参数并将它转换为电信号，然后利用无线电通信和数据传输技术将它传送至终端进行处理、记录和显示。

无线电导航 radio navigation 利用无线电技术精确确定航行体位置并准确引导它沿着预定的航线安全航行的技术和方法。无线电导航对目标的定位主要利用电波传播的三个基本特性：(1)电磁波在自由空间直线传播；(2)电磁波在自由空间恒定以光速传播；(3)电磁波遇障碍物产生反射。

无线电导航按作用距离和任务可分为：近程导航、中程导航、远程导航、着陆引导、河港导航和空中交通管制等；按提供位置线的形式可分为：测角系统、测距系统、测距差系统、测距和系统、测速系统和混合系统等。无线电导航的基准点可以设在地面、空间或卫星上。无线电导航与雷达、通信、电子计算机、显示技术等密切相关，它应用了各种电子技术，并占用了很宽的频率范围(10kHz～24GHz)。

电磁辐射 electromagnetic radiation 电磁能量通过辐射装置在空间激励电磁波并向外传播的现象。常用的辐射装置为天线，当振荡源的波长与天线的尺寸可以相比拟时辐射就显著。

电磁散射 electromagnetic scattering 电磁波照射到某个目标物体上所产生的再辐射。目标的散射特性包括散射截面、频谱响应、传播时延、极化特性和多普勒效应等，它们与目标的结构、大小、形状、取向、位置和运动等特性有关。目标散射的研究包括二方面：(1)根据已知各种目标求其散射信号的特性(正问题)；(2)根据已知的散射信号求其目标的特性：其物理参数的分布或几何形状(逆问题)。电磁散射研究主要用于遥感、无损检测、地球物理、医学成像和雷达目标识别等。

逆散射 inverse scattering 根据给定的入射波和测得的散射波研究散射体的特性，确定其几何形状或物理参数的分布。由散射场求出散射体特性的反演方法是建立在电磁散射理论基础上的。逆散射理论与方法广泛应用于遥感、无损探测、地球物理、医用成像和雷达目标识别等领域。

电磁干扰 electromagnetic countermeasures 电磁干扰是指一切与有用信号无关的、不希望有的或对电子设备和系统产生不良影响的电磁辐射。电磁干扰源分二大类：一类是自然干扰源，如雷电、太阳或宇宙电磁辐射等；另一类是人为干扰源，如高频微波设备、电动机、开关、继电器、氖灯、荧光灯、静电放电及核电磁脉冲等的辐射。

电磁兼容 electromagnetic compatibility 电磁兼容是指设计一个电子设备和系统一方面必须保证它在所处的电磁环境中能正常工作；另一方面也必须限制它自身产生的电磁干扰不致影响其他系统和设备的正常工作。电磁兼容性设计的要求：(1)明确系统的电磁兼容性指标；(2)了解本系统的干扰源、被干扰对象和干扰耦合的途径；(3)合理设计抑制干扰的措施，常用的抑制干扰的方法有：完善的屏蔽装置，合理的接地系统，使用滤波和限幅技术，合理的连接电缆和布线等。

电子对抗 electronic warfare 电子对抗是指敌我双方争夺电磁波频谱控制权的斗争，一方面要截获敌方的电磁频谱，并干扰、抑制它，另一方面要保护己方的电磁频谱不受损害。电子对抗包括：(1)电子侦察：截获敌方的电磁信号并进行分析、识别、定位和记录；(2)电子干扰：分有源干扰和无源干扰，前者利用干扰设备发送干扰电磁波，后者通过反射或吸收敌方辐射的电磁波，以对敌方电子设备进行抑制、欺骗和破坏；(3)电子防御：削弱敌方的电子侦察、电子干扰以保护己方电子设备的工作不受影响。电子对抗的主要对象是雷达、通信、导航、制导、引信、遥控遥测和敌我识别等。

电磁屏蔽 electromagnetic shield 防止或抑制电磁场干扰的措施。屏蔽可分为静电屏蔽、静磁屏蔽和电磁屏蔽,它们抑制的对象分别为静电场、静磁场和电磁波。静电和电磁屏蔽采用接地的金属或金属网、静磁屏蔽采用高导磁率铁磁材料制成空腔壳体隔离场源区和隔离区。

电磁脉冲 electromagnetic pulse (EMP) 电磁脉冲是指无载波的脉冲电磁信号,它的波形具有陡前沿、缓后沿、窄的脉冲宽度和极宽的频带等特点。电磁脉冲产生瞬态电磁场。电磁脉冲从电磁干扰源的角度可分两类:一类是环境电磁脉冲,它主要由核爆炸所产生,它能造成大范围空间的电磁脉冲环境;另一类是系统电磁脉冲,它是由 γ 射线或 X 射线直接打在被干扰对象的壳体上在其局部感生的电磁脉冲现象。

瞬态电磁场 transient electromagnetic field 由电磁脉冲所产生的电磁场。它的研究对象包括:在时域中研究脉冲或宽带信号的暂态电磁过程的规律;研究一个电磁系统在电磁脉冲信号作用下的瞬态响应特性;研究目标对电磁脉冲的逆散射。由于计算机和毫微秒脉冲技术的发展为瞬态电磁场的测量、记录、分析处理和计算提供了条件,瞬态电磁场研究不但丰富了电磁理论,而且具有实用意义。它的主要应用有:(1)了解和防护由核爆炸等产生的强电磁脉冲对电子系统的干扰与破坏;(2)在遥感和雷达目标识别中,根据目标对电磁脉冲信号的散射特性来确定目标的特性;(3)脉冲电磁能的应用,如电磁炮等。瞬态电磁场的研究方法有:(1)间接法:首先作频域分析,然后利用傅里叶反变换得到其时域响应特性;(2)直接法:直接在时域中解关于空间和时间的电磁场的微分或积分方程;(3)奇点展开法:通过作复频域分析求系统响应函数的极点和留数,然后用自然谐振的叠加求时域响应。

微波吸收材料 microwave absorbing material 用于吸收入射微波的能量减小目标反射回波的微波功能材料。它通常可分为两大类:(1)吸收型:由在胶粘剂中加入具有特定介电参数的吸收剂制成,常使用的吸收剂有羰基铁、石墨、碳化硅、铁氧体、金属和金属氧化物磁性超细粉等,并可采用多层结构利用反射电磁波之间的干涉进一步减小反射。吸收型材料可涂在目标表面上或制成尖劈形状用作暗室吸收材料。(2)结构型:将吸收材料与目标的结构材料作为一体,既用于构建目标(如飞机等)又用于吸收微波,常使用的有碳纤维材料等。

隐身与反隐身技术 stealth and unstealth technique 隐身技术是研究如何降低目标(如飞机、导弹、舰船、坦克等)被雷达、红外和声纳等探测系统发现与跟踪的各种技术。反隐身技术是研究如何使隐身措施失效或降低其作用的技术。目标隐身的途径有:(1)改善目标外形设计;(2)采用或涂覆吸波材料;(3)阻抗加载:在目标表面通过开槽、加谐振腔或天线等方法自适应控制再辐射电波使之与目标回波产生相消作用。反隐身技术主要有:(1)采用双/多基地雷达体制;(2)合理设计特殊的雷达波形;(3)采用无载波的冲击雷达;(4)提高检测目标微弱信号回波的灵敏度。

射频和微波波谱学 radio frequency and microwave spectroscopy 因为每种物质都具有其特定的能谱结构,物质的电磁吸收或辐射谱的频率决定于它的原子和分子的能级差,即有 $\Delta E = h\nu$(h 为普朗克常数,ν 为频率)。而由自旋轨道之间或核外电子与原子核自旋之间的相互作用所引起的能级分裂构成的物质的"精细结构"或"超精细结构"的能级差常落在射频和微波频率范围内,所以,测定物质对射频和微波量子的共振吸收或放出的辐射可以研究物质的结构,这就是射频和微波波谱学。

微波遥感 microwave remote sensing 微波遥感是通过检测和处理目标的微波辐射或反射信号从而确定目标特性的一种技术。它分为无源遥感和有源遥感,前者接收目标本身的微波辐射,如微波辐射计;后者是接收目标对遥感器发射的微波的反射,如侧视雷达、微波散射计和微波高度计。微波遥感比之红外和可见光遥感的优点是微波的传播不受黑夜和天气的限制。它可用于探测大地、矿藏,测定大气、海洋、土壤的成分和温度分布及监视农

作物的生长等。

微波全息术 microwave holography 利用目标对微波的散射特性对物体进行照相的技术。它首先记录目标对照射微波所产生的散射场的幅度、相位信息获得微波全息图像，然后由全息图重建目标的微波图像，由于微波能穿透不透光的非金属介质，所以它可以是目标的外观像或介质目标的内部结构像。微波全息可用于机场等的安全检查，利用从卫星上对地球作全天候微波全息照相可及时掌握火山及冰川的活动情况、农作物的生长和病虫害情况等。

微波等离子体 microwave plasma 等离子体是由分别带有正、负电荷的两种粒子所组成的电中性的粒子体系，其中至少有一种粒子是可以运动的。微波等离子体技术包括利用微波产生或加热等离子体以及作等离子体诊断。利用微波激励气体放电可产生等离子体，它可用作光源、高温热源和用于切割、等离子体刻蚀、有机膜沉积及光纤制作等。利用微波通过等离子体时的高频损耗特性，使它大量吸收微波能量从而可加热等离子体。微波等离子体诊断是利用测定微波在等离子体中传输时的衰减和相移来确定等离子体的特性参数：自由电子密度 n_e 和电子温度 T_e，其优点是非接触测量、不会污染等离子体且响应快，它们常用于受控热核反应中。

微波铁氧体 microwave ferrite 一种非金属铁磁材料，它的磁导率为张量，具有磁各向异性的旋磁特性。表征材料性能的参数主要有：张量磁导率 $\overleftrightarrow{\mu}$、饱和磁化强度 M_s、居里点 T、铁磁共振线宽 ΔH 和复介电常数 ε 等。材料按晶体结构可分为石榴石型、尖晶石型和磁铅石型等，并可制成多晶、单晶和薄膜等不同形态。微波在其中传播时具有法拉第旋转(极化面旋转)、共振吸收、相移、场移、双折射和自旋波等效应，利用这些效应可制成各种微波铁氧体器件，常用的有：隔离器、环行器、相移器、调制器、开关、限幅器、磁调滤波器、磁调振荡器和磁表面波延迟线等。

法拉第旋转 Faraday rotation 一个线极化波可以分解为两个等幅的向相反方向旋转的圆极化波，在各向异性介质中，由于两个圆极化波的相速度不等，故在传播过程中合成波的极化面会发生旋转，这种现象就称为法拉第旋转效应。

双折射 birefringence 电磁波在各向异性介质中分解为极化方向不同并以不同速度传播、向两个方向折射的现象。二种射线分别称为寻常射线和非寻常射线。在磁化铁氧体中，当电磁波传播方向垂直于恒定磁场时，沿磁场方向极化和垂直于磁场方向极化的波具有不同的相速，这就产生双折射，也称为科顿-冒顿(Cotton-Mouton)效应。

微波加热 microwave heating 它是利用微波能够深入介质内部使其中水分子引起高频振动而产生介质热损耗，从而对物体进行加热。它的优点是：加热均匀(内外同时加热)、速度快、效率高、具有选择性加热(水分多处加热强)，且易于实现自动控制。我国目前用于加热的微波频率规定为：915MHz 和 2450MHz。微波加热的应用有：家用微波炉，纸张、木材、皮革、食品等的工业加热和干燥，以及矿石的破碎，沥青的熔化，食品、血浆和冷藏器官的解冻等。

微波生物效应 biological effect of microwave 它是指生物体受微波照射后所产生的生物物理、生物化学、组织器官、生理功能等方面的变化。微波辐射在生物体内会产生二种效应：(1)热效应：它使生物组织器官升温，当这种升温能够被血液循环自动调节时就无害，否则就有害；(2)非热效应：它是指除热效应以外引起的生理损伤效应，主要是对神经系统、心血管系统和遗传变异等方面的影响。

生物电子学 bioelectronics 生物电子学是一门新兴的边缘学科，它运用电子学和工程学的理论和方法，在数学的基础上与生物学相结合，以研究有生命物质世界的运动规律(其中包括生物体的结构、功能和相互关系等)。生物电子学研究的范围非常广泛，其内容有：电磁波生物效应理论、生物信息检测与诊断系统、生物医学电子学、分子电子学、生物信息系统建模与仿真和人工神经网络等。

微波医疗 microwave medical treatment 它

是指利用微波来治疗和诊断疾病。微波在人体内的热效应和非热效应可以治疗某些疾病，如关节炎、前列腺炎、神经痛、风湿症、便秘和疖痈等；微波热疗是治疗癌症的重要手段之一，它利用微波照射癌肿使局部升温至43℃以上以杀死癌细胞；微波针灸是将微波引入人体内以提高针灸的疗效。微波诊断是利用测量微波在人体内的传输特性（衰减、相移、偏振、色散等）或接收人体内的微波辐射来诊断人体的某些疾病，如诊断肺气肿、肺水肿和乳腺癌等；另外利用人体组织对微波的散射、衍射可实现微波断层扫描成像（CT）诊断技术。

微波辐射计 microwave radiometer 一种检测在微波波段热辐射噪声信号的非相干接收机。其主要结构与外差式接收机相同。最早的微波辐射计是一种开关式的连续比较法辐射计，称为狄克（Dicke）型辐射计，近代人们又改进并发展了诸如改进狄克式、附加噪声式以及相关式接收等多种型式的辐射计。它的主要指标是灵敏度，它与高频、低频噪声带宽、接收机噪声温度和辐射计类型等有关。它在遥感、射电天文接收、噪声标准和噪声计量等方面有诸多应用。

微波激射器 maser-microwave amplification by stimulated emission of radiation 微波量子放大器和微波量子振荡器的统称。利用微波波段电磁波与原子或分子的量子共振相互作用获得微波放大和振荡的量子器件。若原子或分子的某两个能级的能量差与微波量子能量（$h\nu$）相等且其粒子数反转，则与入射电磁波发生共振相互作用后产生受激发射，从而得到相干放大，为了加强原子与微波的相互作用，可将工作物质放入谐振频率等于原子跃迁频率的谐振腔中，这样就可构成微波量子放大器，如果再加上适当的反馈装置则可构成微波量子振荡器。微波量子放大器具有特别低的噪声，微波量子振荡器的振荡频率特别稳定，可作频率标准，如氢原子量子振荡器的频率稳定度高达10^{-14}数量级。

光电子学 optic electronics 以光波作为信息载体来实现传统电子学中信号的发射、传输、处理、存储、测量和显示等的一门新技术学科。光-电和电-光转换技术是其重要内容。光电子器件主要有作为信息载体的光源、控制和处理器件、传输器件、检测器件和显示显像器件等。光电子学的主要应用有：光纤通信、光雷达、微光夜视仪、太阳能电池和以电信号驱动的发光器件等。

量子电子学 quantum electronics 研究利用物质内部量子系统的受激辐射来放大或产生相干电磁波的原理、器件及其应用的学科，它是微观物理学与电子学相结合的边缘学科。若物质中原子或分子处在高能级的数目大于处在低能级的数目（粒子数反转）且其能量差与入射电磁波的量子能量满足关系 $\Delta E = h\nu$（h 为普朗克常数，ν 为频率）时，则发生相互作用而产生受激辐射从而获得相干放大，再引入适当的反馈机构则可获得相干振荡。在微波和光波波段的量子放大和振荡器件分别称为微波激射器和激光器。

超导电子学 superconductive electronics 研究超导体内超导电子及其与电磁场相互作用的一系列效应的理论、技术，并据以开发新型电子器件和应用的学科，它是超导体物理和电子学相结合的边缘学科。在超导电子学中，超导体的理想超导性、完全抗磁性、超导微观理论、弱场下的微波特性、约瑟夫森效应和超导量子干涉效应等具有重要作用，据以开发研制的超导器件已涵盖了常规器件的各种功能，并具有灵敏度高、频带宽、响应快和功耗低等优点，在高灵敏度电磁测量仪器（如SQUID、磁强计、磁场梯度计等）、微波、毫米波、远红外波段的探测、接收和产生（如超导检测器、混频器、参放、振荡器、谐振腔等）、快速信号处理（包括传输、延迟、滤波、逻辑、存储等）、计量标准及超导计算机等方面的应用已有重大进展，特别是高温超导体的发现和发展更为它的应用开辟了广阔前景。

约瑟夫森效应 Josephson effect 当两块超导体之间存在弱耦合构成结时，库柏电子对可穿越其间的势垒层而形成隧道电流，当隧道电流小于某一临界值（通常在10^{-3}～10^{-6}A范围）时，结两端电压降为零，当电流超过该临界值结两端就有一定电压降 V，这种隧道结中有

电流而不产生电压降的现象称为直流约瑟夫森效应。当在超导隧道结两端加一直流电压 V,在结区将有高频电流流过,其频率为 $f=2eV/\hbar$(e 为电子电荷,$\hbar$ 为普朗克常数的 $1/2\pi$),这种高频电流能辐射和吸收电磁波,这种现象称为交流约瑟夫森效应。利用约瑟夫森效应可制作电磁波检测器、混频器、参量放大器、电压基准、伏特计和磁强计等。

超导量子干涉效应 superconducting quantum interference effect　超导隧道效应和超导磁通量子化相结合的效应。磁通量子化效应是指在超导环或中空超导圆柱内,不可能含任意大小的磁通,而只能含磁通量子数 ϕ_0($\phi_0=h/2e=2.07\times10^{-15}$ Wb)整数倍的磁通。当超导环内含有约瑟夫森结时,便呈现一种宏观的量子干涉现象,即零电压时结的最大超流 I_{max}是穿过环路磁通的周期函数,其周期为磁通量子 ϕ_0,应用这种效应制成的器件称为超导量子干涉器件,也称 SQUID,有直流 SQUID 和射频 SQUID 两类,它是精密电磁测量的基础,用作磁强计可用于检测极微弱的磁场(如地磁、生物磁),还可用作磁场梯度计、伏特计、超导天线、数字逻辑电路元件和超导重力仪等。

超导延迟线 superconducting delay line　用于将电信号延迟一段时间的超导传输线,它可以是超导同轴线或同轴电缆,也可以是超导平面传输线,如超导微带线或共面线等。由于超导体的直流电阻为零,因此它比常规金属延迟线的衰减更小,且在很宽的频带内几乎无色散,它是毫微秒和亚毫微秒脉冲信号的传输、延迟、存储和加工的基本单元,主要用于脉冲示波器、计算机的高速存储元件、实时接收机的信号处理电路和通信等领域。

超导电压基准 superconducting voltage reference　利用交流约瑟夫森效应中电压与频率的关系,即在约瑟夫森结上加直流偏置电压 V_0 时,能产生频率 $f_0=2eV_0/\hbar$(e 为电子电荷,$\hbar$ 为普朗克常数的 $1/2\pi$)的振荡电流,当同时以频率为 f 的微波辐照结时,则它将对振荡产生相位调制,使结的 $I-V$ 特性出现电流阶梯,第 n 个阶梯电压 $V_n=n\dfrac{\hbar f}{2e}$。它由 f 决定,由于 $\dfrac{\hbar}{e}$和 f 可精确测定(精度分别达 10^{-7} 和 10^{-9}),因此,以此可作为高精度电压基准。

天线方向图 directional pattern of antenna　天线辐射或接收电磁波的相对强度在空间中随方向变化的图形,也称天线辐射图或波瓣图。用电场或磁场强度来表示辐射强度的方向图称为场强方向图;用功率来表示的称为功率方向图。天线方向图是一个立体图形,在实际中通常用二个最重要的平面方向图来表示,它们分别包含辐射最大值和电场 E 或磁场 H 的平面,称为 E 面方向图或 H 面方向图。天线方向图一般呈花瓣形状,其中包含所需最大辐射方向的波瓣称为主瓣,其余的称为旁瓣或副瓣。

波束宽度 beamwidth　指天线主瓣所张的角度范围,通常用功率降至主瓣最大值一半的两点之间的夹角来表示,也称半功率波束宽度。它可以表示天线集中辐射的程度,可作为角度分辨率的量度。

天线方向性系数和增益 directivity and gain of antenna　表示天线集中辐射程度的一个参量。以向各方向均匀辐射的理想点源(均匀辐射器)作为比较基准,天线方向性系数定义为:在总辐射功率相同时,天线在最大辐射方向的辐射功率密度 P 与均匀辐射器在该方向的辐射功率密度 P_0 的比值,用分贝表示为

$$D = 10\lg\frac{P}{P_0}\quad(\mathrm{dB})$$

(总辐射功率相同)

天线增益定义为:在总输入功率相同时,天线在最大辐射方向的辐射功率密度 P 与均匀辐射器在该方向的辐射功率密度 P_0 的比值,用分贝表示为

$$G = 10\lg\frac{P}{P_0}\quad(\mathrm{dB})$$

(总输入功率相同)

天线增益与方向性系数的关系为

$$G=\eta D\quad(G、D\text{ 以倍数表示})$$

η 为天线效率。

辐射效率 radiation efficiency　指天线总辐射功率 P_r 与总输入功率 P_{in}之比值,即

$$\eta = \frac{P_r}{P_{in}}$$

天线的输入功率除大部分转化为辐射功率外，还有部分功率将损耗在天线结构及其周围的金属体、绝缘体与地面上。

辐射电阻 radiation resistance 它是一个等效电阻，当流过该电阻(R_r)的电流等于天线输入端电流(I_0)时，它所消耗的功率就等于天线的辐射功率(P_r)，即有

$$P_r = \frac{1}{2} I_0^2 R_r$$

辐射电阻的大小与天线的尺寸、形状及工作波长有关，例如，偶极子天线的辐射电阻 $R_r = 80\pi^2\left(\frac{h}{\lambda}\right)^2$($h$ 为偶极子的有效长度，λ 为工作波长)，为了使天线更好辐射应使辐射电阻尽可能大。

天线阻抗 antenna impedance 指天线在输入端(馈电点)所呈现的阻抗，它等于天线馈电电压与馈电电流的比值，它通常是一个复数，实部 R_i 称为输入电阻，虚部 X_i 称为输入电抗。

天线阻抗(Z_i)与辐射功率(P_r)、损耗功率(P_d)和储存的无功能量之间的关系为

$$Z_i = \frac{P_r + P_d + 2j\omega(W_m - W_e)}{\frac{1}{2} I_0 I_0^*}$$

式中 W_m 和 W_e 分别为储存在近区感应场中的平均磁能和电能，I_0 为输入端电流。当 W_m 和 W_e 相等时，出现谐振，这时 Z_i 的电抗部分为零，在理想情形下，天线阻抗应等于辐射电阻。

研究天线阻抗的目的是为了实现天线与馈线间的匹配，对发射天线，应使天线的输入阻抗等于馈线的特性阻抗；对于接收天线，应使天线的输入阻抗等于负载阻抗的共轭值。

天线阵 antenna array 由若干个相同的天线单元按一定规律排列并相互连接在一起组成的天线系统，用于产生强方向的辐射。天线阵的辐射场是组成它的单元天线辐射场的矢量和，其特性取决于单元的型式、位置、排列方式及其激励幅度和相位，天线阵的方向图等于单元天线的方向图与阵方向图的乘积。天线阵按单元的排列方式可分为线性阵、平面阵和三维立体阵，其各单元的中心分别排列在一条直线上、一个平面上或飞行器的非平面共形表面上；按辐射图形的指向可分为边射阵、端射阵和非边射非端射阵，边射阵的最大辐射方向垂直于阵列直线或阵平面；端射阵的最大辐射方向沿阵列直线或阵平面。

方向图乘积原理 principle of pattern multiplication 求天线阵方向图的基本原理，它指明天线阵的方向图应等于组成它的天线单元的方向图函数和阵方向图函数的乘积。阵方向图函数决定于各单元的位置、排列方式及其相对激励幅度和相位。

八木天线 Yagi antenna 由一个有源振子、一个无源反射器和若干个无源引向器平行排列组成的一种线形端射天线，因它由八木秀次(日本)最先提出而得名。

有源振子通常采用折叠式半波振子($l \approx 0.48\lambda$)，它的辐射在无源反射器和引向器上产生高频感应电流，为了得到单向辐射和提高增益，应适当调节反射振子和引向振子的长度与间距，以获得合适的感应电流幅度与相位；增加引向器的数目可进一步提高增益而获得窄波束。

八木天线的优点是结构简单、馈电方便、重量轻和转动灵便，缺点是频带窄、计算复杂和调整困难，它广泛应用于米波段和分米波段。

螺旋天线 helical antenna 由金属导线绕成螺旋形状而组成的天线，通常其始端接同轴线内导体，同轴线外导体与金属板(网)相连接。螺旋天线的辐射方向决定于螺旋直径(D)与波长(λ)之比，当 $D/\lambda < 0.18$ 时，辐射最大方向垂直于螺旋轴，且在包含轴的平面上有 8 字形方向图；当 D/λ 为 0.25～0.46 时，辐射最大方向沿螺旋轴，并辐射圆极化波。螺旋天线具有宽频带特性。

螺旋天线按其表面形状可分为柱面螺旋、圆锥螺旋和平面螺旋等，按螺旋所遵循的数学形式可分为等角螺旋、阿基米德螺旋等。

喇叭天线 horn antenna 由波导的终端渐变张开而形成矩形或圆形截面的面天线。有由圆波导扩展成的圆锥喇叭；由矩形波导的宽边或窄边扩展成的 H 面或 E 面扇形喇叭和两边

同时扩展且具有公共交点的角锥喇叭等。圆锥和角锥喇叭辐射的是球面波；扇形喇叭辐射的是柱面波。

喇叭天线结构简单，易于与自由空间匹配，且具有中等方向性，可作为单独天线、馈源或天线阵中的辐射单元使用。

有时为了控制方向图，要求喇叭口径上具有多模场分布，为此在喇叭内引入多模激励装置从而构成多模喇叭，它常用于单脉冲雷达和卡塞格伦天线的馈源。

抛物面天线 parabolic antenna 由抛物面反射器和位于其焦点上的照射器（馈源）组成的面天线。通常采用金属的旋转抛物面、切割旋转抛物面或柱形抛物面作为反射器，采用喇叭或带反射器的对称振子作馈源。

根据光学原理，焦点上发射的球面波经抛物面反射后转换为平面波，从而获得窄波束高增益的辐射。有时为了减小馈源对辐射的遮挡，以改善天线效率和旁瓣特性，常采用只取一侧的一部分的切割抛物面作反射器以使馈源偏离其反射场的作用范围，这样构成的称为偏置抛物面天线。

抛物面天线一般辐射笔形波束，通过合适截取或修正抛物面形状还可获得扇形波束或赋形波束。

抛物面天线具有较高增益、宽频带、低旁瓣，并可获得各种形状的波束，它广泛应用于微波和波长更短的波段。

卡塞格伦天线 Cassegrain antenna 一种双反射面天线，主反射面为旋转抛物面，副反射面为旋转双曲面，因其原理同卡塞格伦望远镜而得名。它的初级馈源放在双曲面的一个焦点上，双曲面的另一个焦点与抛物面的焦点重合，馈源辐射的球面波经双曲面反射后等效于由抛物面焦点辐射的球面波照射抛物面，经反射后成为平面波。

有时为了提高天线效率，可修正副反射面形状，使主反射面口径场等幅分布；修正主反射面形状使口径场等相分布，这样构成的称为整形卡塞格伦天线。

卡塞格伦天线具有高增益、低噪声（可在初级馈源附近安装低噪声放大器）特性，广泛应用于卫星通信地面站和单脉冲雷达中。

缝隙天线 slot antenna 由导体面上开缝隙形成的天线。缝隙可开在平板上、圆筒上、波导壁上或飞行体共形表面上，它通常取长条形。缝隙可以由跨接的传输线、波导或谐振腔馈电。

缝隙天线的辐射特性类似于振子天线。缝隙天线常用于构成波导缝隙天线阵，它分为二类：谐振阵和非谐振阵，谐振阵中各缝隙同相馈电，最大辐射方向在阵法线方向；非谐振阵中各缝隙有一定的相位差，其最大辐射方向与阵法线有一角度。

缝隙天线结构简单、便于制造、易于与表面共形，常用于雷达、导航和通信等。其缺点是频带窄。

透镜天线 lens antenna 一种能够通过电磁波、将点源或线源的球面波或柱面波转换为平面波从而获得笔形、扇形或其他形状波束的天线。通过合适设计透镜表面形状和折射率 n（$n=\sqrt{\varepsilon_r}$），调节电磁波的相速以获得辐射口径上的平面波前。透镜可用天然介质（$n>1$）制成，也可用由金属网或金属板等构成的人造介质（$n>1$ 或 $n<1$）制成。

微带天线 microstrip antenna 指在背面有导体接地板的介质基片上贴上导体薄片构成的天线。利用微带或同轴探针馈电，通过贴片与接地板间的隙缝向外辐射。微带天线有微带贴片天线、微带振子天线和微带阵列天线，它们的贴片形状分别为矩形、圆形、椭圆形或窄长条偶极子及其阵列。微带天线具有体积小、重量轻、成本低，可与微波集成电路一起集成，便于共形以及易于获得圆极化和实现多频段工作等优点，但它的频带窄、辐射效率低、功率容量小。

有源天线 active antenna 在只含金属和介质的普通天线中接入如晶体管、隧道二极管或变容二极管等有源器件就组成有源天线。

加入有源器件可改善天线的阻抗、展宽频带、降低噪声以及实现天线的小型化。

相控阵天线 phased array antenna 相控阵天线是通过控制阵列天线中各辐射单元的馈电相位来改变方向图形状的天线。它的关键

部件是电调相移器和天线辐射单元。相移器有连续式和数字式，它们的相移值分别在360°范围内连续和步进变化，前者采用铁氧体相移器，后者采用半导体PIN二极管相移器；辐射单元常采用喇叭、开口波导或波导裂缝。利用相控阵天线可实现电控波束扫描，克服机械扫描惯性大、速度慢的缺点，能产生特殊的方向图形和实现多功能自适应控制。

自适应天线 adaptive antenna 能够按照外部情况的快速随机变化实时自动实现性能最优化的天线系统。它由天线阵列和自适应处理系统组成。自适应系统用于处理外部情况和需要的变化，产生控制信号控制阵列各辐射元的激励以获得最优化的辐射方向图和极化等。

自适应天线常应用于雷达、通信、电子对抗和射电天文等。

载波通信 carrier-current communication 利用频分多路复用原理在一对线(二线制)或二对线(四线制)上实现多路通信的通信方式。每路电话占4kHz，但它们并不直接调制到线路载频上，而是按国际电报电话咨询委员会(CCITT)建议的标准群(见下表)逐级调制为基群、超群、主群和超主群，形成积木式的多路频率结构，达到所需的路数后再调制到线路载频上，这样便于组成转接载波通信系统。

载波通信系统有二线制和四线制两种传输方式，二线制利用一对线作双向传输，来去各用不同的频带；四线制来去各用一对线而传输频带相同。

载波通信系统主要由终端机、增音机和通信线路(明线、对称电缆和同轴电缆)三部分组成。

国际电报电话咨询委员会建议的标准群表

群名	载波机容量/路	线路频谱/kHz	带宽/kHz
基群	12	60～108	48
超群	5×12＝60	302～552	240
主群	5×60＝300	812～2044	1232
超主群Ⅰ	3×300＝900	8516～12388	3872
超主群Ⅱ	15×60＝900	312～4028	3716

微波中继通信 microwave radio relay communication 以微波为载波，利用视距中继站作接力传输实现的远距离无线电通信方式。由于微波直线传播和地球曲率的限制，所以每隔40～60公里应设立中继站，用于接收上一站的信号，经变频、放大后再转发至下一站，逐级接力直至终端站。微波中继通信具有频带宽、容量大、干扰小、保密性好、投资费用较少和维护方便等优点。

微波中继通信系统由终端站、用户站和中继站组成。终端站用于收发全部线路信号，用户站用于取出或加入部分线路信号并中继，中继站只单纯中继，各站的基本设备包括天线、馈线、发射机、接收机、调制器、解调器、多路复用设备和监控设备等。

卫星通信 satellite communication 卫星通信系统由地面站和通信卫星组成。它以通信卫星作为中继站，接收一个地面站的信号，经放大、变频后再发送给另一地面站接收从而实现两站之间通信。因为微波能穿透电离层，所以卫星通信必须采用微波作为载波，常用的频段为：上行5.925GHz～6.425GHz、下行3.7GHz～4.2GHz。目前还发展上行14.0GHz～14.5GHz、下行11.7GHz～12.2GHz。为了保证卫星对地面站相对静止，故卫星一般采用运转速度与地球自转速度相同的同步卫星，其轨道在赤道上空约35800公里处，如卫星天线的波束宽度为17°～18°，它就可覆盖1/3地面，所以三颗同步卫星即可实现全球通信。卫星通信的优点是通信距离远、覆盖面广、不受地理条件限制、容量大、可靠性高、成本与通信距离无关等。

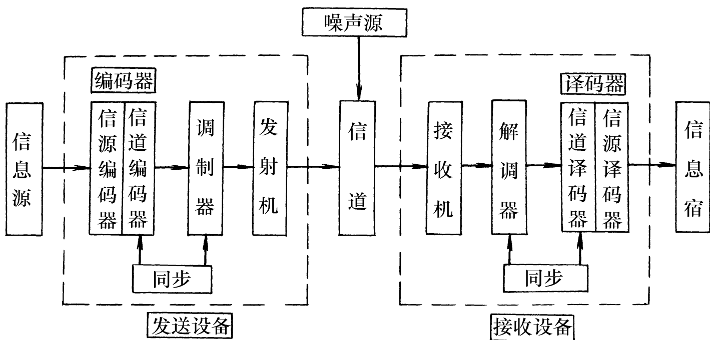
光纤通信 optical fiber communication 利用

光纤传输信息的通信技术。在发送端用需传送信号去调制光波实现电-光转换；在接收端进行光-电转换用光电管解调恢复传送的电信号。光纤通信使用的波长为0.8～1.7微米，目前常用0.85微米的多模光纤、1.3微米和1.55微米的单模光纤。由于单模光纤的带宽更宽、损耗更小，所以是今后光纤通信的主流。光纤通信的优点为损耗小、通信容量大、保密性强、节约铜材、不受电磁干扰和抗核辐射等。

散射通信 scatter communication　利用大气层中不均匀介质对电磁波的散射作用使部分波束返回地面而实现的超视距无线电通信。散射通信有对流层散射通信、电离层散射通信和流星余迹通信。散射通信一般使用超短波和微波波段，其特点是通信距离远，一般在几百公里至上千公里，通信稳定可靠。它广泛应用于跨越海峡、湖泊、沙漠、高山和边远地区的通信，但要使用大功率发射机、高灵敏度接收机和高增益定向天线，并要采取抗衰落技术。

移动通信 mobile communication　通信双方或一方在移动中进行的通信方式。移动通信包括地面、航海和航空移动通信，地面移动通信系统有：共用电话系统（蜂窝式移动通信网）、集群系统（调度性专用网）、无线寻呼系统和无绳电话。移动通信使用频率为：25MHz～1000MHz，常用150MHz、450MHz和900MHz三个频段。移动通信必须使用无线电传输，其信道传输特性较复杂而不稳定，常采用抗干扰性能较好的调频制。目前，移动通信正向数字化、集群化、微型化、标准化和建立综合网的方向发展。

数字通信 digital communication　传送离散数字信号的通信方式。传统的模拟通信传送的是话音、图像等连续模拟信号，数字通信或将模拟信号经数字化后再传送然后在接收端再恢复为模拟信号，或直接传送数字信号（如计算机间的数据通信）。数字通信系统的组成如下图，消息信号经信源编码器转换为数字信号（A/D转换），再经信道编码器进行纠错编码，然后经调制器调制到高频载波上后发送，其接收端的过程则相反。数字通信的优点是：抗干扰能力强，数字信号可通过再生消除噪声积累的影响；可靠性高，采用纠错编码可对传输中的差错进行纠错；可进行加密实现保密通信；便于使用计算机技术进行处理、存储、交换，实现综合业务数字网；便于集成化。其缺点是占用频带宽和需要较复杂的同步系统。



数字通信系统的组成

频分多路复用通信 frequency division multiplex communication　通过频谱搬移技术将各话路信号的频带相互错开、顺序排列组成一个宽频带的综合信号，在一个信道上传输，接收时再通过带通滤波器进行分路，从而在一个信道上实现多路通信的方式。它要求通信系统

的线性特性要好,否则将会引起严重的非线性互调干扰。

时分多路复用通信 time division multiplex communication 在数字通信中,因为信道的传输速率总大于每路信号的传输速率,因此将各话路信号在一个信道上顺序轮流在不同的时间间隔内传输,它们都相等地占有信道的整个频带,接收时采用同步技术进行分路,从而在一个信道上实现多路通信的方式。它要求通信系统要有高精度的同步系统。

码分多路复用通信 code division multiplex communication 在数字通信中,利用各路信号码型结构的正交性而在一个信道上实现多路通信的方式。在发送时将各路信号分别与正交码发生器的一个码序列相乘,多路信号在一个信道上传输,接收时再将接收码序列与本地的和发送端相应的正交码序列相乘进行相关处理实现分路。它具有强的抗窄频带干扰能力、保密性好,但电路较复杂,也需要有高精度的同步系统。

雷达方程 radar equation 表示雷达最大作用距离和雷达工作参数的关系式。典型的雷达方程为

$$R_{\max}=\left[\frac{P_t G_t G_r \sigma\lambda^2 F_t^2 F_r^2}{(4\pi)^3 (S/N)_{\min} k T_s B_n L}\right]^{3/4}$$

式中:P_t 为发射功率,G_t 和 G_r 分别为发射和接收天线的增益,σ 为目标散射截面,λ 为工作波长,F_t 和 F_r 为目标与发射和接收天线之间的方向图传播因子,$(S/N)_{\min}$ 为最小检测信噪比,k 为玻尔兹曼常数,T_s 为系统噪声温度,B_n 为接收机噪声带宽,L 为总损耗系数。

雷达散射截面 radar scattering cross section 表征目标向雷达接收天线方向散射电磁波能力的一个等效参量。它是将实际目标等效为一个垂直于电波入射方向的截面积,当它把所截获的雷达照射功率向各方向均匀散射时,在接收天线方向的功率密度恰好与目标所产生的相同。

目标的雷达散射截面 σ 定义为

$$\sigma = 4\pi R^2 \times \frac{\text{目标在接收天线处单位面积上的散射功率}}{\text{雷达在目标处单位面积上的照射功率}}$$

若测出雷达的接收功率 P_r,则有

$$\sigma=\frac{(4\pi)^3 R^4 P_r}{G^2\lambda^2 P_t}$$

式中 P_t 为雷达发射功率,G 为天线增益,λ 为波长,R 为雷达至目标的距离。上式是实验测定 σ 的基本公式。目标的 σ 与目标的几何尺寸、形状、材料、目标视角、雷达工作频率和天线的极化有关。

连续波雷达 continuous wave radar 以发射连续波进行工作的雷达。它通常有二种类型:(1)多普勒雷达:发射单一频率的连续波信号,接收活动目标的回波,检测二者之频率差——多普勒频移,确定目标的径向速度;(2)调频雷达:发射频率按一定规律(通常为锯齿、三角等)调制的连续波信号,检测滞后的目标回波与现时发射波的频率差,确定回波的滞后时间,指示目标的距离。

多普勒雷达 Doppler radar 利用活动目标的多普勒效应测定目标的径向速度的雷达。它通常有连续波多普勒雷达和脉冲多普勒雷达两类。前者发射单频连续波等幅信号,由多普勒频移确定目标的径向速度;后者发射高重复频率(使不存在速度模糊)的脉冲波信号,从有强杂波的回波中分离出活动目标的多普勒频率谱线确定径向速度,并由回波脉冲的延迟时间确定目标的距离。

单脉冲雷达 monopulse radar 它是一种跟踪雷达。天线同时发射几个波束,然后接收它们的“和”与“差”信号,由“和”信号确定距离信息,由“差”信号确定角(方位角和仰角)信息,由差信号与和信号的相位差(同相或反相)确定角误差的方向,从而驱动天线跟踪目标。

单脉冲体制通常有幅度比较单脉冲和相位比较单脉冲。

合成孔径雷达 synthetic aperture radar 利用与目标作相对运动的小孔径天线,通过对信号进行存储、处理的方法得到大孔径天线的效果,从而获得高分辨率的相干成像雷达,且又利用脉冲压缩技术获得高的距离分辨率。

合成孔径雷达分为非聚焦型和聚焦型两类,前者对回波信号直接相加合成,而后者对回波信号采用匹配滤波或相关技术进行相位校正

和同相相加，其方位分辨率比前者更高，且不受波长和目标距离的影响。合成孔径雷达对频率和相位稳定性要求严格，且需对载机的不规则运动进行补偿。合成孔径雷达广泛应用于军事侦察、测绘、制导、遥感和资源探测等。

脉冲压缩雷达 pulse-compression radar 发射宽带宽脉冲信号，接收时将回波压缩成窄脉冲的雷达。它的优点是既增加了雷达的作用距离，又提高了距离分辨率，还具有较强的反干扰能力。为了接收时将宽脉冲压缩成窄脉冲，发射的宽脉冲中必须包含窄脉全部频谱分量，常采用调频(线性或非线性)编码或相位编码，接收时脉冲的压缩常采用匹配滤波或相关积分。

相控阵雷达 phased array radar 利用相控阵天线实现电子扫描的雷达。由大量排成阵列的辐射单元构成的相控阵天线，通过改变各单元的馈电相位可改变天线的方向图形状和指向，在天线口径不动时实现电子扫描。相控阵雷达由发射系统、接收系统、相控阵天线和计算机组成，利用计算机可根据目标性质和分布自适应地选择工作方式和参数，一部相控阵雷达可同时完成多种功能，如对多目标的搜索、跟踪、制导等。相控阵雷达具有扫描速度快、多功能、高数据率和多目标处理能力等特性。

Thermodynamics
热 力 学

一、系统的描述与规律
Description and Laws of System

经典热力学方法 method of classical thermodynamics 热力学是研究多体系统的唯象理论。通常划分为经典热力学和不可逆热力学两部分。经典热力学方法是建立在系统处于平衡态或可逆过程的基础上,进而引入相应热力学参量描述热力学规律和热物理性质。这些热力学参量又区分为独立参量、状态参量、强度量、广延量(参看热学相关词条)或相应的响应函数。

在经典热力学研究方法中,又把系统分为两类:封闭系统和开放系统。封闭系统(简称闭系)是指系统粒子数不变的一类常见的热力学系统。而开放系统是指系统中粒子数可与媒质交换或粒子本身可以产生或湮没的一类系统(参见统计物理相关词条)。应该指出,朗道(Landau)相变理论不仅丰富了经典热力学内容,而且大大推动了其广泛应用,读者可参看朗道相变理论、超导热力学、液氦物理相关词条。

内参量 internal parameter 系统处于热力学平衡态,是由系统本身的热物理特性与外界媒质相互作用后达到的。若描述该平衡态系统的热力学参量本身就是该系统的宏观参量,如系统的温度、压强、密度、化学势等,就称它们为该系统的内参量。对于多元多相系统,相对大系统而言,描述每一个相的热力学参量也是该大系统的内参量。

外参量 external parameter 系统处于平衡态,是由系统与媒质间相互作用形成的。那些描述由外部环境决定系统状态的热力学参量称为外参量。例如封闭在气缸中的气体体积,是由气缸的容积决定的。所以该气体的体积就为外参量。那些处于重力场中气体系统的重力场,处于外磁场中磁介质的磁场强度等都是典型的外参量。再如封闭在体积为 V 的二相系统。虽然 V 为外参量,但这二相各自的体积却与该二相系统处于二相平衡的条件有关,它们是该系统的性质,所以这二相各自的体积却是该系统的内参量。

几何变量 geometrical variable 热力学采用几何变量来描述平衡态系统。常用的有体积、比容、表面积或长度。这些变量选取的原则参看热学的独立参量和力学变量词条。

力学变量 mechanical variable 热力学选用独立参量,习惯上选取与系统元功表式相关的参量,从这种意义而言,经典热力学最初选择的独立参量并不是首先引入自己的物理参量,而是借用其他学科已经定义了的物理量,这些学科牵涉到经典力学、几何、化学和电磁学。这样做并不是热力学方法的缺点,反而使热力学理论具有广泛的应用性。

热力学常用的力学变量有压强、张力、应力、表面张力等。

电磁变量 electromagnetic variable 热力学常采用如下电磁变量为独立参量,它们有磁场强度、磁感应强度、磁化强度、电场强度、电极化强度、电动势或电荷等。这类参量选用的原则与优点请参见“独立参量”和“力学变量”词条。

化学变量 chemical variable 热力学常用如下化学变量描述平衡态系统:如物质的量,粒子数,组分等。

广义力 generalized force 热力学第一定律中元功表式可以普遍写为

$$\text{đ} W = p\,\mathrm{d}V - F\,\mathrm{d}L - \sigma\,\mathrm{d}A - E\,\mathrm{d}(PV) - \mu_0 H\,\mathrm{d}(MV) \qquad (1)$$

该式右边第一项为机械功,第二项为弹性功,第三项为表面功,第四项为电场功,第五项为磁场功。其中有关参量含义参看热学独立参量词条。热力学把 p、F、σ、E、$\mu_0 H$ 称为广义力,并用 Y_i 代表。而把 $\mathrm{d}V$、$\mathrm{d}L$、$\mathrm{d}A$、$\mathrm{d}(PV)$、

d(MV)称为广义位移,以 dX_i 代表。据此式(1)可以一般写为:

$$đW = -\sum_i Y_i dX_i \tag{2}$$

广义位移 generalized displacement　参见“广义力”词条。

热力学性质 thermodynamical property　物理学指一个材料的热力学性质,主要是指该系统的物态方程和定压比热或定容比热。因为如果知道该系统的物态方程和定压或定容比热其中一个,热力学理论就可以通过热力学关系求导出该系统其他的热力学性质。但是大部分系统很难寻求出具体的物态方程明确的解析形式,这样热力学就寻求描述物态相关参量的响应函数来替代。这些响应函数是该系统的膨胀系数、压缩系数或压强系数。这些响应函数也表征一个具体系统的热力学性质。

气体物态方程 state equation of gas　最普通气体物态方程有理想气体物态方程和范德瓦尔斯(van der Waals)方程。

另外常用的还有克劳修斯(Clausius)方程,

$$\left(p + \frac{a}{T(V+C)^2}\right)(V-b) = nRT \tag{1}$$

伯特洛(Berthelot)方程有两个:

第一方程

$$\left(p + \frac{a}{TV^2}\right)(V-b) = nRT \tag{2}$$

第二方程

$$pV = nRT\left(b - \frac{a}{nRT^2}\right)p \tag{3}$$

迭特里奇(Dieterici)方程

$$p(V-b) = nRTe^{-\frac{a}{nRTV}} \tag{4}$$

比特-比里兹曼(Beattie-Bridgman)方程

$$pV = nRT(1-\varepsilon)\left(1 + \frac{B}{V}\right) - \frac{A}{V} \tag{5}$$

其中

$$\varepsilon = \frac{c}{TV^3},\ A = A_0\left(1 - \frac{a}{V}\right),$$

$$B = B_0\left(1 - \frac{b}{V}\right)$$

一般情况,气体物态方程可用位力(Virial)展开表示,常称昂内斯(Onnes)方程。该方程有对压强 p 展开和对体积 V 展开两种形式:

$$pV = A + Bp + Cp^2 + Dp^3 + \cdots \tag{6}$$

或

$$pV = A + \frac{B'}{V} + \frac{C'}{V^2} + \frac{D'}{V^3} + \cdots \tag{7}$$

$A, B, C, \cdots$ 和 $B', C', \cdots$ 称位力系数,它们是温度 T 的函数。

混合非理想气体物态方程 state equation of mixing non-ideal gas　不遵从道尔顿气体分压定律的气体属混合非理想气体。该气体物态方程可以用如下级数形式表示:

$$p - \sum_i p_i = \frac{1}{V^2}\left(\sum_{i,j} B_{ij} n_i n_j - \sum_i B_{ii} n_i^2\right) + \frac{1}{V^3}\left(\sum_{i,j,l} C_{ijl} n_i n_j n_l - \sum_i C_{iii} n_i^3\right) + \cdots \tag{1}$$

这里 p_i 是指第 i 个组元在温度 T,体积 V 和物质的量 n_i 单独存在时的压强,其中 B_{ij} 和 C_{ijl} 是温度 T 函数,并满足如下对称关系:

$$B_{ij} = B_{ji} \tag{2}$$

$$C_{ijl} = C_{jil} = C_{lji} = \cdots \tag{3}$$

表面系统物态方程 state equation of surface system　液体处于临界点,表面张力 σ 应为零。对于纯液体与其饱和蒸气处于平衡时,其界面表面系统典型的经验物态方程如下

$$\sigma = \sigma_0\left(1 - \frac{t}{t_c}\right)^n$$

这里 σ_0 为零摄氏度时表面张力,t 是以摄氏温标的温度,t_c 是以摄氏温标标定的临界温度,n 是液体的特征常数,一般在 1 到 2 之间。

如纯水,$\sigma_0 = 75.5\text{dyn/cm}$,$t_c = 374℃$,$n = 1.2$。

电介质物态方程 state equation of dielectric

描述电介质热力学独立参量除 pV 之外,还有电场强度 $\boldsymbol{E}$(V/m)和电极化强度 $\boldsymbol{P}$(c/m^2)。典型的电介质物态方程(单位体积)为

$$p = \left(a + \frac{b}{T}\right)\boldsymbol{E}$$

其中 a, b 为两常数,不同电介质的数值据实验确定。

顺磁盐物态方程 state equation of paramagnetic salt　顺磁盐在外磁场 $\boldsymbol{H}$ 中,单位体积物态方程以居里(Curie)定律表示

$$M=\frac{nD}{T}H$$

M 为磁化强度，n 是物质的量，D 是依赖不同材料的实验常数。T 为温度。

弹性棒物态方程 state equation of stretched wire 弹性棒在弹性极限范围内，可用胡克(Hooke)定律表示

$$F=A(T)(L-L_0)$$

其中 F 为棒中张力(N/m)，$A(T)$ 是温度函数，L 为棒长度，L_0 为当 $F=0$ 时棒长度。

固体物态方程 state equation of solid 不同固体材料有不同物态方程形式。而一般情况，因为固体膨胀系数 α 和压缩系数 κ 随温度和压强变化不激烈，并且体积随 T，p 变化也不大，其物态方程可以这样近似选取

$$\mathrm{d}V=\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T\mathrm{d}p \qquad (1)$$

因为

$$\alpha=\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \qquad (2)$$

$$\kappa=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \qquad (3)$$

式(1)近似积分可写为

$$V=V_0(1+\alpha T-\kappa p) \qquad (4)$$

这就是常用固体物态方程。其中 V_0 为 $T=0$，$p=0$ 的体积。α 和 κ 典型数值为：$\alpha\approx10^{-4}/\mathrm{K}$，$\kappa\approx10^{-10}/\mathrm{Pa}$。

超导体物态方程 state equation of superconductor Ⅰ类超导体和理想Ⅱ类超导体在外磁场下若都是处于热力学平衡态，除 p、V 两独立参量外，和磁介质一样还有磁场强度 H (A/m)和磁化强度 M(A/m)为独立参量，对Ⅰ类超导体，据迈斯纳(Meissner)效应，单位体积物态方程为(不考虑退磁效应)

$$-M=H \quad (T<T_c)$$

$$M=0 \quad (T\geqslant T_c)$$

这里 T_c 为超导转变温度。

理想Ⅱ类超导体，在迈斯纳态仍有 $-M=H$，但是处于混合态，其物态分低外磁场、中外磁场和高外磁场三个区，情况较复杂，这里不再介绍。可参见“超导物理”相关词条。

超导电性唯象理论原则上都是热力学课题，但是习惯上把以超导物态方程为基础所讨论的热力学内容称超导热力学。

热力学规律 laws of thermodynamics 热力学是唯象理论，其热力学规律就是热力学三个定律。它们是热力学过程的三个限制。这三个规律的数学表式为

第一定律

$$\mathrm{d}U=\text{đ}Q-\text{đ}W$$

第二定律

$$\mathrm{d}S\geqslant\frac{\text{đ}Q}{T}$$

第三定律

$$\lim_{T\to0}(\Delta S)_T=0$$

上式中 U 为内能，S 为熵，Q、W 分别是热量和功，T 是温度，符号(　　)$_T$表示等温过程。关于第一、二定律参见热学有关词条。第三定律参见热力学有关词条。

化学势 chemical potential 化学势是物理内容丰富的热力学强度量，如果说温度是表征系统能量以热量传递的趋势，压强表征能量以功传递的趋势，那么化学势是表征系统与媒质，或系统相与相之间，或系统组元之间粒子转移的趋势。粒子总是从高化学势向低化学势区域、相或组元转移，直到两者相等才相互处于化学平衡。对于单组元系统，化学势就是单位质量的吉布斯自由能，而对单相多元系统，第 i 个组元化学势是系统吉布斯函数偏摩尔量，定义为

$$\mu_i=\left(\frac{\partial G}{\partial n_i}\right)_{T,p,\bar{n}_j}$$

式中 $\bar{n}_j$ 表示除 n_i 之外其他组元粒子数不变。这里 μ_i 是温度 T，压强 p 和 σ 个组元组分 χ_i 的函数($i=1,2,\cdots,\sigma$)。即

$$\mu_i=\mu_i(T,p,\chi_1,\chi_2,\cdots,\chi_i,\cdots,\chi_\sigma)$$

化学势也与内能等其他特征函数偏摩尔量相关。

偏导数关系 partial derivative relations 若某热力学系统独立变量为(x，y)两个，而 Z 和 W 都为该系统的状态函数。通过解析计算可以证明上列四个参量有如下在热力学方法中常用的偏导数关系

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x=\frac{1}{\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x}$$

$$\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x=-\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y\left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z$$

$$\left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)_x=\left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)_x\left(\frac{\partial z}{\partial y}\right)_x$$

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)_y=\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)_z+\left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)_x\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y$$

关于独立参量和状态参量物理内容请参看相关词条。

热力学第三定律 third law of thermodynamics 1906年能斯特(Nernst)总结在低温区大量的化学反应提出了如下基本假设

$$\lim_{T\to 0}(\Delta S)_T=0$$

即在绝对温度趋向于零时,所有等温过程的熵不变。熵在 $T\to 0$K 时与其他任何热力学参量如压强、外磁场等无关,是纯常数,可选取为零。能斯特定理(假设)发表十年后,就变成了举世公认的热力学第三定律。

能斯特定理一个直接的结论是绝对零度可以无限接近,但是不能到达。其原因是在极低温下能降温的惟一过程仅能为绝热过程,而且要求等熵过程。但是在 $T\to 0$K 时,熵成了纯常数,与其他参量变化无关,没有参量变化,那就形不成等熵过程,因而绝对零度无法达到。

据能斯特定理,容易得到被实验证实的三个结论:

(1)当温度趋近于绝对零度时,所有材料膨胀系数趋近于零;

(2)当温度趋近于绝对零度时,所有材料定压比热与定容比热趋于相等,即在极低温下区别定压比热与定容比热已无意义;

(3)当温度趋近于绝对零度时,材料的相平衡曲线的斜率趋向于零。

能斯特因建立热力学第三定律和化学热力学成就,荣获1920年诺贝尔化学奖。

能斯特定理 Nernst theorem 能斯特定理就是指热力学第三定律能斯特的叙述(参见热力学第三定律词条)。该定律有些文献中也称能斯特-西蒙(Nernst-Simon)第三定律叙述。

公理式热力学 axiomatic thermodynamics 喀拉氏(Caratheodory)在1909年首先提出公理式热力学方案。该理论企图类同几何公式那样把热力学基本定律描述出来。

标准态 normal state 气体处于0℃和1个大气压下的状态,称标准态。这时空气密度 $\rho=0.00129\ \mathrm{g/cm^3}$,定压比热与定容比热之比 $\gamma=1.41$。

二、均匀系统
Uniform System

全微分变换 exact differential transformation 全微分变换是热力学变换独立变量的一种数学方法。例如通常把热力学第一定律写为

$$\mathrm{d}U=T\mathrm{d}S-p\mathrm{d}V$$

该式表明内能 U 为独立变量(S, V)的微分式。因为熵不能直接测量,因而上式和实验结果不方便比较,但是如果对上式引进全微分变换,利用

$$\mathrm{d}S=\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V\mathrm{d}T+\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T\mathrm{d}V$$

再注意到

$$C_V=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T=\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V$$

这样内能微分式变为

$$\mathrm{d}U=C_V\mathrm{d}T+\left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V-p\right]\mathrm{d}V$$

该式就很容易通过系统的定容热容量和物态方程讨论实际热力学过程了,这就是全微分变换的意义。

勒让德变换 Legendre transformation 勒让德(Legendre)变换在热力学中主要用于变换热力学第一定律的独立变量。通常第一定律表式为

$$\mathrm{d}U=T\mathrm{d}S-p\mathrm{d}V \tag{1}$$

该式表明内能以熵 S 和体积 V 为独立变量的状态函数全微分式。

现在我们引进另一个新状态函数

$$F=U-TS \tag{2}$$

并且有

$$dF = dU - TdS + SdT \quad (3)$$

将式(3)dU代入式(1),可得到用新状态函数F所表达的热力学第一定律:

$$dF = -SdT - pdV \quad (4)$$

F称亥姆霍兹(Helmholtz)自由能,或简称自由能。这种引进一个新状态函数,将式(1)的独立变量与相应共轭变量进行置换的数学方法称勒让德变换。

雅可比变换 Jacobian transformation 在如下以U,V为变量函数$f(U、V)$的二重积分

$$I = \int f(U, V)dUdV \quad (1)$$

中,若将该式作如下变数变换,可改变为(x, y)为变量的积分,设U、V与$(x、y)$的关系为

$$U = U(x, y) \quad (2)$$

$$V = V(x, y) \quad (3)$$

那么式(1)可写为

$$I = \int f[U(x, y), V(x, y)]Jdxdy \quad (4)$$

J称雅可比行列式,表式为:

$$J = \begin{vmatrix} \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial U}{\partial y}\right)_x \\ \left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_y & \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right)_x \end{vmatrix} \quad (5)$$

并简单记为

$$J = \frac{\partial(U, V)}{\partial(x, y)} \quad (6)$$

容易证明雅可比行列式有下列特性

$$\frac{\partial(U, V)}{\partial(x, y)} = -\frac{\partial(V, U)}{\partial(x, y)} \quad (7)$$

$$\frac{\partial(U, y)}{\partial(x, y)} = \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_y \quad (8)$$

$$\frac{\partial(U, V)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial(U, V)}{\partial(s, t)}\frac{\partial(s, t)}{\partial(x, y)} \quad (9)$$

热力学应用雅可比行列式上列三个特性,在求导热力学关系中,再借助于常用热力学关系(如麦克斯韦(Maxwell)关系),进行变数变换,以证明希望求导的关系式。该数学方法称雅可比变换。

例如,要求证明如下热力学关系:

$$\left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_V = C_V\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V \quad (10)$$

用雅可比行列式性质(式(8)),有

$$\left(\frac{\partial U}{\partial p}\right)_V = \frac{\partial(U, V)}{\partial(p, V)} \quad (11)$$

再用(9)式

$$\frac{\partial(U, V)}{\partial(p, V)} = \frac{\partial(U, V)}{\partial(T, V)}\frac{\partial(T, V)}{\partial(p, V)} = C_V\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V \quad (12)$$

将式(12)代入式(11),就证得(10)式。

如果在证明热力学关系中读者对雅可比变换应用熟练,你会发现该方法在求证热力学关系诸方法中最为简单方便。

特征函数 characteristic function 将封闭系统热力学第一定律

$$dU = TdS - pdV \quad (1)$$

进行勒让德(Legendre)变换,可以引入如下3个新状态函数:焓(H),自由能(F),和吉布斯(Gibbs)自由能(G)。并且用它们表达出的第一定律分别为

$$dH = TdS + Vdp \quad (2)$$

$$dF = -SdT - pdV \quad (3)$$

$$dG = -SdT + Vdp \quad (4)$$

一般情况,称U、H、F、G为状态函数,因为它们是该系统任一对独立变量的单值函数,而且dU、dH、dF、dG是全微分。但是在某一特定情况U、H、F、G又称特征函数。这特定情况是内能表达为独立变量$(S、V)$函数,H表达为(S, p)函数,F表达为(T, V)函数、G表达为$(T、p)$函数。并且把该特定情况的独立变量$(S、V)$、(S, p)、$(T、V)$、(T, p)称为它们相应特征函数的特征变量。

为什么热力学选择特征变量引入相应的特征函数呢?因为特征函数能反映一个具体系统的热力学性质。我们以特征函数$G(T, p)$为例讨论其特征性。如果一个具体系统的$G(T, p)$函数表达式已知,通过式(4)可以求得

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p \quad (5)$$

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_T \quad (6)$$

式(6)表明V作为(T, p)为独立变量的函数已知,即

$$V = V(T, p) \quad (7)$$

这就是该系统的物态方程。

据式(5)可以求出的定压热容量：

$$C_p = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_p = -T\left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_p \quad (8)$$

知道某系统的物态方程和一个热容量，通过热力学关系就可以求得该系统其他的热力学性质。这是热力学方法特点之一。如上特性就是把 $U(S、V)$、$H(S, p)$、$F(T, V)$、$G(T, p)$称为特征函数的物理原因。

这里我们仅限于(p, V)系统，介绍了特征函数。对于其他系统，如磁介质、电介质等也有相应的特征函数。在工程热力学研究中，系统的热力学性质多以物态方程和比热表征，而在物理学研究领域，特征函数应用更广泛，有效。

特征变量 characteristic variable 某系统特征函数所对应的独立变量称该特征函数的特征变量。例如内能函数的特征变量为熵 S 和体积 V，而焓的特征变量为熵 S 和压强 p，自由能的特征变量为温度 T 和体积 V，而吉布斯(Gibbs)自由能的特征变量为温度 T 和压强 p。因为后两个特征函数的特征变量容易测量，所以有较广泛应用。参看特征函数词条。

自由能 free energy 自由能 F，也称亥姆霍兹(Helmholtz)自由能。是系统的状态函数。其定义为

$$F = U - TS \quad (1)$$

对应第一定律表式可写为

$$dF = -SdT - pdV \quad (2)$$

据该表式，自由能有两点明确的特征：(1)在等温过程中系统与媒质能量以功的形式交换，其数值为系统自由能的变化；(2)以(T, V)为独立变量的自由能是特征函数。(参见"特征函数")

自由能另一个重要物理特征是系统等温等容约束条件下平衡条件为自由能趋向于极小值。有其一级变分为零

$$\delta' F = 0 \quad (3)$$

这是自由能称热力势的原因。参见"平衡条件与热力势"。

吉布斯自由能 Gibbs free energy 吉布斯(Gibbs)自由能是系统状态函数。是独立变量的全微分。定义为：

$$G = U + pV - TS \quad (1)$$

因为焓 $H = U + pV$，所以式(1)又可写为

$$G = H - TS \quad (2)$$

故 G 又称自由焓。用 G 表达的第一定律为

$$dG = -SdT + Vdp \quad (3)$$

因为吉布斯自由能是以(T, p)为特征变量的特征函数，因而它在物理学中有广泛应用。该函数特点有如下六点：(1) G 是状态函数，系统在等温等压过程中对外所做之功等于吉布斯自由能减小；(2) G 是以(T, p)为特征变量的特征函数(参见特征函数词条)；(3)理想气体单位摩尔吉布斯自由能为

$$g = RT[\varphi(T) + \ln p] \quad (4)$$

其中 R 为理想气体常数，

$$\varphi(T) = -\frac{1}{R}\int \frac{\int c_p dT}{T^2} dT + \frac{h_0}{RT} - \frac{S_0}{R} \quad (5)$$

这里 c_p 为定压摩尔比热，h_0 和 S_0 为 $T = 0K$ 时摩尔焓和熵常数；(4)单元单相系统化学势 μ 就为单位质量的吉布斯自由能 g；(5)在等温等压约束条件下系统平衡条件为吉布斯自由能趋向于极小，即

$$\delta G = 0 \quad (6)$$

(6)磁介质通常为固体，如忽略其体积效应，定义单位体积的吉布斯自由能为

$$g = U - \mu_0 HM - TS \quad (7)$$

对应单位体积磁介质第一定律表式为

$$dg = -SdT - \mu_0 MdH \quad (8)$$

这里 μ_0 为真空磁导率，M 为磁化强度，H 为磁场强度。式(8)在铁磁学和超导物理有重要应用。

金兹堡-朗道(Ginzburg-Landau)唯象地提出超导体的吉布斯自由能形式，使超导物理研究获得巨大进展，这成了热力学理论应用的典范之一(参见超导物理相关词条)。

广势函数 grand potential 粒子数可变的单元单相系统的第一定律为

$$dU = TdS - pdV + \mu dn \quad (1)$$

该式的粒子数 n 以摩尔为单位。

对式(1)引进如下勒让德(Legendre)变换，

$$\Omega = U - TS - \mu n \quad (2)$$

粒子数可变的第一定律利用式(2)可写为

$$d\Omega = -SdT - pdV - nd\mu \quad (3)$$

该式 Ω 就称为广势函数。它是状态函数，是以 (T, V, μ) 为独立变量的全微分。它实际上是粒子数可变系统的特征函数，在统计物理系综理论有重要应用，可参看相关词条。

克拉默斯函数 Kramers function 克拉默斯(Kramers)函数定义为：

$$K = -\frac{\Omega}{T} \tag{1}$$

这里 Ω 为广势函数(参见广势函数词条)。

克拉默斯函数据式(1)定义，其全微分表式可以写为如下形式

$$\mathrm{d}K = -U\mathrm{d}\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{p}{T}\mathrm{d}V + n\mathrm{d}\left(\frac{\mu}{T}\right) \tag{2}$$

这里 U 为内能，μ 为化学势，n 为物质的量。

式(2)显然有利于讨论粒子数可变系统的热力学关系。

马休函数 Massiou function 据热力学第一定律

$$T\mathrm{d}S = \mathrm{d}U + p\mathrm{d}V - \sum_i \mu_i \mathrm{d}n_i \tag{1}$$

如果引入如下勒让德变换：

$$\Psi = -\frac{F}{T} \tag{2}$$

Ψ 称马休函数，F 为自由能。其 Ψ 的全微分表式为

$$\mathrm{d}\Psi = -U\mathrm{d}\left(\frac{1}{T}\right) + \frac{p}{T}\mathrm{d}V - \frac{1}{T}\sum_i \mu_i \mathrm{d}n_i \tag{3}$$

即 Ψ 是 $\frac{1}{T}$、V 和 n_i 为独立变量的状态函数。

普朗克函数 Plank function 对热力学第一定律(参见马休函数词条)作如下勒让德变换

$$\Phi = -\frac{G}{T} \tag{1}$$

G 为吉布斯函数，就得到以 $\frac{1}{T}$，p 和 n_i 为独立变量的普朗克函数 Φ，并且有

$$\mathrm{d}\Phi = -H\mathrm{d}\left(\frac{1}{T}\right) - \frac{V}{T}\mathrm{d}p - \frac{1}{T}\sum_i \mu_i \mathrm{d}n_i \tag{2}$$

这里 H 为焓。

吉布斯-亥姆霍兹方程 Gibbs-Helmholtz equation 吉布斯-亥姆霍兹(Gibbs-Helmholtz)方程是联系特征函数与其他状态函数之间相关性的热力学关系。通常称吉布斯-亥姆霍兹方程指如下两个方程

第一吉布斯-亥姆霍兹方程，它是联系特征函数自由能 F 求内能函数 U 的方程

$$U = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_V \tag{1}$$

第二吉布斯-亥姆霍兹方程，它是已知吉布斯自由能求状态函数焓的方程

$$H = G - T\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p \tag{2}$$

亥姆霍兹第一个应用该方程讨论了可逆电池的电动势。

理想气体吉布斯函数 ideal gas Gibbs function 因为理想气体物态方程已知，为 $pV = nRT$，再加之该气体定压比热一般情况可视为温度函数，这样可求得理想气体单位摩尔吉布斯函数为

$$g = RT[\varphi(T) + \ln p]$$

这里的 $\varphi(T)$ 是纯温度函数，具体形式参看吉布斯自由能词条。

理想气体吉布斯函数在热力学中经常被应用，例如近似求蒸气压曲线，液滴形成和大小问题。这是因为在常压和室温条件下水蒸气可以用理想气体近似。

麦克斯韦关系 Maxwell relations 热力学麦克斯韦(Maxwell)关系指如下四个热力学关系

$$\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_S = -\left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_V \tag{1}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p \tag{2}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T = \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \tag{3}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{4}$$

Maxwell 关系的重要性表现在如下三点：(1)每一个方程都表示两个状态函数偏导数之间数值相等，因此极有利于用它们求证其他热力学关系；(2)每一个方程两边偏导数都有相应的物理含义，有利于对特定系统过程性质地讨论。

例如式(2)可以改写为

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_S = \frac{T}{c_p}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{5}$$

该式表示膨胀系数大的气体,通过绝热膨胀过程温度下降也大;(3)麦克斯韦关系不仅适用于 pV 系统,它可以改动到其他系统。例如表面系统的麦克斯韦关系只要作下列变换

$$p \to -\sigma \quad V \to A \tag{6}$$

σ 为表面张力,A 为表面积。可将式(1)～(4)改写为表面系统的麦克斯韦关系:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial A}\right)_S = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial S}\right)_A \tag{7}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \sigma}\right)_S = -\left(\frac{\partial A}{\partial S}\right)_\sigma \tag{8}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial A}\right)_T = -\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T}\right)_A \tag{9}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \sigma}\right)_T = \left(\frac{\partial A}{\partial T}\right)_\sigma \tag{10}$$

内能公式 internal expression 通常内能公式是指系统以(T, V)为独立变量联系内能偏导数与物态方程相关偏导数的表式

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p \tag{1}$$

该式极有利于已知某系统物态方程去讨论该系统内能的性质。例如理想气体物态方程代入式(1)右边求得为零,有

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T = 0 \tag{2}$$

故利用式(2)可得到理想气体内能仅为温度函数的结论。

***TdS* 公式 *TdS* expression** 热力学第一定律一般可写为

$$T\mathrm{d}S = \mathrm{d}U + p\mathrm{d}V \tag{1}$$

该式数学上表示 $T\mathrm{d}S$ 以独立变量内能 U 和体积 V 的公式。因为内能不易测量,我们只要利用

$$\mathrm{d}U = c_V\mathrm{d}T + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_T \mathrm{d}V \tag{2}$$

再用内能公式(参见内能公式词条),可以把式(1)改为

$$T\mathrm{d}S = c_V\mathrm{d}T + T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \mathrm{d}V \tag{3}$$

该式称第一 $T\mathrm{d}S$ 公式。若已知某系统 c_V 和物态方程,用该式极方便讨论系统的吸热、熵变或绝热过程的性质。因而有广泛应用。

式(3)还可以改为以(T, p)为独立变量的表式,称第二 $T\mathrm{d}S$ 公式

$$T\mathrm{d}S = c_p\mathrm{d}T - T\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}p \tag{4}$$

以及以(p, V)为独立变量的第三 $T\mathrm{d}S$ 公式:

$$T\mathrm{d}S = c_V\left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_V \mathrm{d}p + c_p\left(\frac{\partial T}{\partial V}\right)_p \mathrm{d}V \tag{5}$$

如上三个 $T\mathrm{d}S$ 公式也可变换到电磁系统或其他系统,因而 $T\mathrm{d}S$ 公式应用十分广泛。

比热差公式 heat capacity difference expression 把定压比热 c_p 和定容比热 c_V 之差与物态方程相关的偏导数联系起来的热力学关系式称比热差公式

$$c_p - c_V = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{1}$$

如果用理想气体物态方程代入上式,容易写出大家熟悉的理想气体比热差公式

$$c_p - c_V = R \tag{2}$$

利用系统膨胀系数

$$\alpha = \frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \tag{3}$$

和压缩系数定义

$$\kappa = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \tag{4}$$

比热差公式还可表示为

$$c_p - c_V = TV^3\kappa\alpha^2 \tag{5}$$

比热公式 speciftic heat expression 某材料的物态方程与比热是两个独立的热学性质。但是它们之间也有一定的解析关系。应用 $T\mathrm{d}S$ 公式,可证明:

定容比热表式

$$c_V = c_V(T, V_0) + T\int_{V_0}^{V}\left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2}\right)_V \mathrm{d}V \tag{1}$$

定压比热表式

$$c_p = c_p(T, p_0) - T\int_{p_0}^{p}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial T^2}\right)_p \mathrm{d}p \tag{2}$$

从上列两式看,仅仅是比热常数 $c_V(T, V_0)$ 和 $c_p(T, p_0)$ 是独立于物态方程系统的热力学性质。

光子气体热力学 photon gas thermodynamics 光子气体就是指空腔内的辐射场。在一定

温度 T 下，处于平衡态的光子气体有如下两点基本热力学性质（参见黑体辐射词条）：(1)内能密度 u 仅仅是温度函数；(2)有压强公式

$$p=\frac{1}{3}u$$

承认如上两点基本性质，利用热力学内能公式，第一 TdS 公式和吉布斯(Gibbs)函数定义，可以得到光子气体如下性质：(1) $u=aT^4$；(2)体积为 V 光子气体的熵

$$S=\frac{4}{3}aVT^3$$

(3)吉布斯函数 $G=0$，其中 a 为常数。

太阳常数 solar constant 在地球大气层之外单位面积所接收到太阳每秒正射的能量称太阳常数。测量值为1.75尔格/秒。

磁致伸缩与压磁效应 magnetostriction and press magnetic effects 一般磁介质程度不同地表现出磁致伸缩和压磁效应两个物理现象。所谓磁致伸缩是指磁介质体积随外磁场增加而变化，压磁效应是指磁介质的磁化强度因受外界机械压强的增加而变化。这两个现象表面上看来是相互独立的现象。但是因为这两者变化过程磁介质和外界都有功的交往，据热力学第一定律，这两个过程都会引起磁介质内能 U 的变化。所以两者产生了关联。记该磁介质体积为 V，磁化强度为 M，据热力学第一定律

$$dU=TdS-pdV+\mu_0 Hd(VM) \quad (1)$$

若定义磁介质吉布斯自由能

$$G=U+pV-TS-\mu_0 H(VM) \quad (2)$$

式(1)经勒让德(Legendre)变换变为

$$dG=-SdT+Vdp-\mu_0(VM)dH \quad (3)$$

因为 dG 为全微分，有

$$\left(\frac{\partial V}{\partial H}\right)_{T,p}=-\mu_0\left[\frac{\partial(VM)}{\partial p}\right]_{T,H} \quad (4)$$

该式的左边以偏导数形式表明，磁介质在等温、等压过程的磁致伸缩效应的强度。而该强度在数值上通过式(4)与该介质在等温等磁场强度的压磁效应强度负值相等。这就是热力学唯象理论论证的磁介质总是存在两个效应数值之间的相关性，也是热力学理论成功之处。

电卡效应 electrocaloric effect 单位体积电介质 TdS 公式为

$$TdS=C_E dT+T\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_E dE \quad (1)$$

这里 C_E 为等电场比热（单位体积），P 为极化强度，E 为电场强度。在绝热过程 $dS=0$。式(1)为

$$\left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_S=-\frac{T}{C_E}\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_E \quad (2)$$

从该式可知，若 $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_E<0$，电介质在外电场下因电场强度下降而降温，这就是用电介质降温的电卡效应。

若用电介质物态方程（见电介质物态方程词条），式(2)可写为

$$\left(\frac{\partial T}{\partial E}\right)_S=\frac{b}{C_E T}E \quad (3)$$

电卡效应也有称热电效应(electrothermal effect)。

压电效应 piezoelectric effect 弹性棒电介质热力学第一定律可表示为：

$$dU=TdS+\boldsymbol{F}dL+EdP \quad (1)$$

这里 $\boldsymbol{F}$ 为棒中张力，L 为棒长，E 为电场强度，P 为电极化强度。

引入新状态函数

$$G_E=U-TS-\boldsymbol{F}L-EP \quad (2)$$

对式(1)进行勒让德变换，

$$dG_E=-SdT-Ld\boldsymbol{F}-PdE \quad (3)$$

有

$$\left(\frac{\partial L}{\partial E}\right)_{T,\boldsymbol{F}}=\left(\frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{F}}\right)_{T,E} \quad (4)$$

$\left(\frac{\partial P}{\partial \boldsymbol{F}}\right)_{T,E}$ 称压电系数，它和电介质电致伸缩(electrostriction)相关。

电致伸缩 electrostriction 弹性电介质棒，电致伸缩系数定义为

$$\left(\frac{\partial L}{\partial E}\right)_{T,\boldsymbol{F}}$$

L 为棒长度，E 为电场强度，$\boldsymbol{F}$ 为棒中张力。它与电介质压电效应紧密相关（参见压电效应词条）。

表面自由能 surface free energy 对于表面系统，热力学第一定律在可逆过程表式为

$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S + \sigma \mathrm{d}A \qquad (1)$$

这里 σ 为表面系统的表面张力，A 为表面积。

引进表面系统自由能

$$F = U - TS \qquad (2)$$

据勒让德变换，式(1)为

$$\mathrm{d}F = -S\mathrm{d}T + \sigma \mathrm{d}A \qquad (3)$$

据表面系统物态方程，表面张力 σ 仅仅是温度函数，$\sigma = \sigma(T)$。

从式(3)有

$$\sigma = \left(\frac{\partial F}{\partial A}\right)_T \qquad (4)$$

因为 σ 与 A 无关，得到

$$F = \sigma A + f(T) \qquad (5)$$

利用 $A=0, F=0$ 条件

得
$$F = \sigma A \qquad (6)$$

或
$$\sigma = \frac{F}{A} \qquad (7)$$

式(6)、(7)表示：表面系统自由能就为其表面张力和表面之积，或表面系统表面张力即为单位面积的表面自由能。这个特性来源于表面系统表面张力仅仅是温度函数。

表面内能密度 surface internal energy density

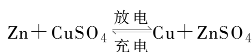
表面系统自由能 F 与表面积呈线性关系(见表面自由能词条)。同样因为表面系统表面张力 σ 仅为温度函数，表面系统内能密度 U 也仅仅为温度函数，内能与表面积 A 也呈线性关系。其证明很简单：因为据表面系统内能公式

$$\left(\frac{\partial U}{\partial A}\right)_T = -T\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} + \sigma \qquad (1)$$

即
$$u = -T\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} + \sigma \qquad (2)$$

$$U = uA \qquad (3)$$

可逆电池 reversible cell 常见可逆电池是铜锌为两电极的电池。将铜锌板插入稀硫酸中将在溶液中产生如下物化可逆反应过程：



$$\mathrm{Zn} + \mathrm{CuSO_4} \underset{\text{充电}}{\overset{\text{放电}}{\rightleftharpoons}} \mathrm{Cu} + \mathrm{ZnSO_4}$$

其示意图如图。图中开关 K 所接位置为放电过程。放电：Zn 溶入溶液留下两电子在 Zn 极(负极)，Zn 成正离子 Zn^{2+}，同时 Cu^{2+} 离子到 Cu 极(正极)获两个电子成中性 Cu 沉积在铜板上。充电时上列过程反方向进行。

热力学理论研究可逆电池采用正极电荷量改变 $\mathrm{d}q$ 和两极之间的电动势 ε 构成广义功表式

$$\text{đ}W = -\varepsilon \mathrm{d}q \qquad (1)$$

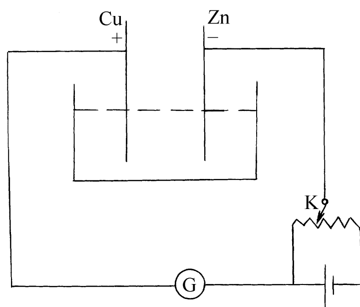
其中 ε 为稀溶液所处温度 T 函数，$\varepsilon = \varepsilon(T)$。而

$$\mathrm{d}q = ZF\mathrm{d}n \qquad (2)$$

这里 Z 为正离子价、F 为法拉第常数($F=96491.4\mathrm{C/mol}$)，n 为正离子物质的量。

可逆电池热力学第一定律表示为

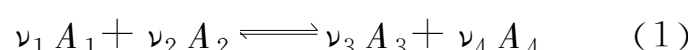
$$\mathrm{d}U = T\mathrm{d}S - p\mathrm{d}V + \varepsilon \mathrm{d}q \qquad (3)$$



可逆电池示意图

G 为电流计，K 为分压器

可逆电池反应热 reaction heat of reversible cell 任何一个化学反应都可能放出或吸收反应热，可逆电池一般是四个组元之间在等温等压下反应。即



$$\nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 \rightleftharpoons \nu_3 A_3 + \nu_4 A_4 \qquad (1)$$

其反应热定义为

$$\Delta H = \nu_3 h_3 + \nu_4 h_4 - \nu_1 h_1 - \nu_2 h_2 \qquad (2)$$

$\Delta H > 0$ 时是吸热反应，$\Delta H < 0$ 时为放热反应。这里 h_1, h_2, h_3, h_4 分别为各相相应组元的摩尔焓。ΔH 是温度函数，应用可逆电池热力学第一定律(见可逆电池词条)，上列物化反应的焓差可表示为

$$\mathrm{d}H = T\mathrm{d}S + V\mathrm{d}p + \varepsilon \mathrm{d}q \qquad (3)$$

由此可证明反应热与温度关系为

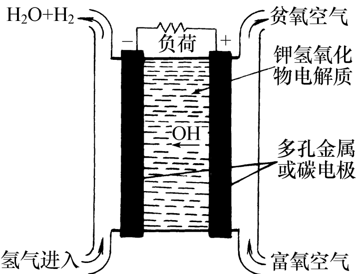
$$\Delta H = \left(\varepsilon - T\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{\mathrm{d}T}\right)\Delta q \qquad (4)$$

通常用可逆电池物化反应，电动势 ε 和反应热为下表所示。(选自 M.V.Zemansky, *Heat and*

Thermodynamics, fifth edition)

化学反应	T/K	价/j	电动势 ε/V	$\frac{d\varepsilon}{dT}$ /(mV/deg)	反应热 /(kJ/mol)
$Zn + CuSO_4 = Cu + ZnSO_4$	273	2	1.0934	−0.453	−235
$Zn + 2AgCl = 2Ag + ZnCl_2$	273	2	1.0171	−0.210	−207
$Cd + 2AgCl = 2Ag + CdCl_2$	298	2	0.6753	−0.650	−168
$Pb + 2AgI = 2Ag + PbI_2$	298	2	0.2135	−0.173	−51.1
$Ag + \frac{1}{2}Hg_2Cl_2 = Hg + AgCl$	298	1	0.0455	+0.338	+5.45
$Pb + Hg_2Cl_2 = 2Hg + PbCl_2$	298	2	0.5356	+0.145	−96.0
$Pb + 2AgCl = 2Ag + PbCl_2$	298	2	0.4900	−0.186	−105

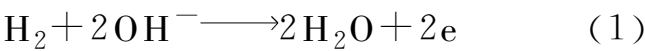
燃料电池 fuel cell 燃料电池是比内燃机热能转换效率高的装置，其氢-氧燃料电池装置原理图如图所示。正、负电极是金属（如镍）烧结的多孔材料、孔径仅微米量级，以增加反应面积。在两电极之间充以氢氧化钾溶液，供给 OH^- 根完成燃料电池物理化学反应。



氢-氧燃料电池装置简图

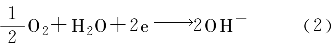
（M. W. Zemansky, *Heat and thermodynamics*, fifth edition）

在负极一侧，流入的氢分子与 OH^- 根作用生成水，并且释放出两个电子



$$H_2 + 2OH^- \longrightarrow 2H_2O + 2e \qquad (1)$$

在正极一侧，氧分子与水作用，并获取两个电子生成 OH^- 根



$$\frac{1}{2}O_2 + H_2O + 2e \longrightarrow 2OH^- \qquad (2)$$

其反应物和剩余物在各自一侧排出。这样被 OH^- 根“搬运”的电子在负荷电路中流过而对外做功。对一摩尔氢氧根，若记离子价为 Z，电动势为 ε，其功 $W = ZN_F\varepsilon$，N_F 为法拉第常数。据热力学第一定律，该过程反应热 ΔH 为

$$\Delta H = Q + ZN_F\varepsilon \qquad (3)$$

Q 为燃料电池与周围的热交换。

在大气压强下，温度为 298K，氢-氧燃料电池 $\Delta H = -286$kJ/mol，$Q = -48$kJ/mol，求得 ε 数值为 1.23V。

丹尼尔电池 Daniel cell 丹尼尔电池就是指可逆电池中的 Cu-Zn 电池。（参见可逆电池词条）

瓦格纳-恩杰耳哈特电池 Wagner-Engelhardt cell 瓦格纳和恩杰耳哈特使熔融银溶解在熔融金中所构成的电化学可逆电池称瓦格纳-恩杰耳哈特电池。

三、相平衡与相变

Phase Equilibrium and Transition

相 phase 被媒质包围的热力学系统处于平衡态，一般情况系统内部还可能分割为若干物理性质与化学性质均匀的部分。这些部分之间有明显的界面分开。每一均匀部分称为该

系统的某一个相。这些各自明显分开的相，可以借用常用热力学参量描述，这些参量也称为该系统的内参量。各相之间具有不同的热物理性质。

组元 constituent　组元是热力学系统化学组成稳定的各部分。它可以是化学元素、化合物或合金。在系统中，不同相之间所包含的组元数不一定相同。例如不挥发性物质溶解于水，在水的气相就基本没有该物质。组元的概念一般用于化学组成的系统，但这概念也可发展到不同基本粒子组成的系统。

组分 mole fraction　一个 k 相 σ 元系统，在第 α 相第 i 个组元如粒子数所具有物质的量为 n_i^α，那么该组元在 α 相的组分定义为

$$\chi_i^\alpha = \frac{n_i^\alpha}{\sum_{i=1}^{\sigma} n_i^\alpha} \tag{1}$$

可见组分在每一个相满足规一条件

$$\sum_{i=1}^{\sigma} \chi_i^\alpha = 1 \tag{2}$$

组分并且是强度量，一般为温度 T 和压强 p 的函数。

组分也有称摩尔浓度，摩尔分数。

单元单相系统 single constituent and phase system　指一个组元组成的物理性质各处均匀的系统。如果单元单相系统处于非平衡态，因而各部分物理性质有可能不均匀，但是这些物理性质对温度、压强或其他参量的依赖关系(或函数形式)不可能突变。如有突变，那一部分发生了相变(参见相变词条)。

多元多相系统 system of heterogeneus composed of many constituents　系统中包含物理性质均匀的若干相，而各相之间又包含若干化学组分，这些化学组分各相之间可以相同或不同，称为多元多相系统。

偏摩尔内能 partial molar energy　对有化学反应或无化学反应的单相多元系统(设有 σ 个组元)，系统的内能应为各组元粒子数的一次齐次函数，在温度 T 压强 p 不变情况下，若该系统粒子数扩大 λ 倍，据一次齐次函数性质，系统内能与粒子数关系有下列性质：

$$U(T, p, \lambda n_1, \lambda n_2, \cdots, \lambda n_i, \cdots, \lambda n_\sigma) = \lambda U(T, p, n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots, n_\sigma) \tag{1}$$

据欧拉(Euler)定理，有

$$U = \sum_{i=1}^{\sigma} n_i \left(\frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{2}$$

n_i 为第 i 个组元物质的量，$\bar{n}_i$ 表示在式(2)求偏导数时除 n_i 之外，其他组元粒子数不变。

定义：

$$U_i = \left(\frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{3}$$

为偏摩尔内能。

这里介绍的是单相多元系统，对于多元多相系统，其偏摩尔量定义是类似的，对 α 相有

$$U_i^\alpha = \left(\frac{\partial U^\alpha}{\partial n_i^\alpha} \right)_{T, p, \bar{n}_i^\alpha} \tag{4}$$

另外，系统的体积、熵、焓都是粒子数的一次齐次函数，所以也有相应偏摩尔量定义，以单相系统为例：

偏摩尔体积

$$V_i = \left(\frac{\partial V}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{5}$$

偏摩尔熵

$$S_i = \left(\frac{\partial S}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{6}$$

偏摩尔焓

$$h_i = \left(\frac{\partial H}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{7}$$

因为第 i 个组元化学势定义就为

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, p, \bar{n}_i} \tag{8}$$

所以明显有

$$G = \sum_{i=1}^{\sigma} n_i \mu_i \tag{9}$$

偏摩尔焓 partial molar enthalpy　参见“偏摩尔内能”词条。

偏摩尔体积 partial molar volume　参见“偏摩尔内能”词条。

偏摩尔熵 partial molar entropy　参见“偏摩尔内能”词条。

偏摩尔热容量 partial molar heat capacity　系统的热容量也是系统粒子数的一次齐次函数，以单相多元系统为例，第 i 个组元的定压偏摩尔热容量：

$$C_{pi}=\left(\frac{\partial C_p}{\partial n_i}\right)_{T,p,\bar{n}_i} \quad (1)$$

定容偏摩尔热容量

$$C_{Vi}=\left(\frac{\partial C_V}{\partial n_i}\right)_{T,p,\bar{n}_i} \quad (2)$$

这里的 $\bar{n}_i$ 表示在求上列偏导数时除 n_i 变化之外其他组元物质的量不变。

均匀系统 pure system 可以用一个物态方程来描述其热物理性质的系统称均匀系统,单相单元,单相多元系统是均匀系统。但是均匀系统不一定是由化学元素或化学材料组成的系统,它也可以由基本粒子,甚至是场(电场、磁场)组成的系统。

二相系统 two phase system 二相系统除包括由化学组分组成的单元二相系统、多元二相系统之外,还包括电子,甚至是磁通量子等组成的二相系统。所以二相系统是比单元二相或多元二相系统内容更广泛的二相体系,在物理学中有重要地位。

相平衡条件 phase equilibrium condition 相平衡条件,实际上就是二相共存条件。对于 α 相与 β 相二相共存的多元二相系统,其相平衡条件是任一组元的化学势在两相之间数值都相等,即

$$\mu_i^{\alpha}(T,p)=\mu_i^{\beta}(T,p) \quad (1)$$

$$i=1,2,\cdots,\sigma$$

这里 σ 指该二相系统有 σ 个组元。

对非化学组元组成的系统,如晶格中的电子系统,二相共存条件常用单位体积两相的吉布斯(Gibbs)函数相等表示,

$$g^{\alpha}(T,p)=g^{\beta}(T,p) \quad (2)$$

在Ⅰ类超导体中间态,超导正常畴和超导畴共存就为一例。高温超导体正常态出现相分离现象也是二相共存实例。

化学平衡条件 chemical equilibrium condition 一般化学反应方程可写为

$$\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i A_i=0 \quad (1)$$

A_i 代表进行化学反应的反应物和生成物。ν_i 为化学平衡常数。并且规定反应物的 $\nu_i<0$,而生成物的 $\nu_i>0$。

如上化学反应(包括核反应)的化学平衡条件为

$$\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i\mu_i=0。 \quad (2)$$

这里 μ_i 是第 i 个反应物的化学势。

稳定性条件 stability condition 通常热力学稳定性条件是指粒子数不变均匀系统稳定性条件,对于 pV 系统指

$$C_p\geqslant 0 \quad (1)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T\leqslant 0 \quad (2)$$

详细参看热稳定性条件、力稳定性条件和化学稳定性条件词条。

与式(1)、(2)对应,磁介质稳定性条件是

$$C_H\geqslant 0 \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial M}\right)_T\geqslant 0 \quad (4)$$

热稳定性条件 thermal stability condition 这是热力学系统第一个稳定性条件,要求

$$C_V\geqslant 0$$

其物理含义是如果把一个微小的热量加入到系统中去,系统的温度必相应升高,以阻止热量进一步传入,系统才能稳定。否则,若 $C_V<0$,系统吸热温度下降,热量将进一步传入,导致系统不能稳定。

力稳定性条件 force stability condition 系统力稳定性条件为等温压缩系数 κ_T

$$\kappa_T\geqslant 0$$

其物理含义是:如果热力学系统体积自发增大,其内部压强必然相对媒质减小,于是周围环境以较大压强阻止系统体积增大,以达到稳定。否则若 $\kappa_T<0$,将导致内部压强增大,系统体积愈来愈大,不能稳定。

化学稳定性条件 chemical stability condition 系统化学稳定性条件是化学势对粒子数的导数大于零,在等温等压条件下有

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial n}\right)_{T,p}\geqslant 0$$

其物理内容是:若外界有粒子转移到系统中去,系统化学势要增加,以阻止粒子进一步进入。否则系统将成为物质陷阱,不能稳定。

亚稳态 metastable state 这实际上是某种

热力学系统处于某种平衡态的特殊情况。系统处于亚稳态也满足平衡条件和稳定性条件。但是该系统往往受外界小的干扰即向稳定的平衡态过渡。例如通常过冷液体或过饱和气体就是处于亚稳态。

相变 phase transition　所谓相是物理性质(或热物理性质)均匀的系统的一部分。但是若该相因为某物理参量如温度、压强、外磁场等变化,使该相的某物理性质(如密度、摩尔熵、比热等)发生突变,则称该相发生了相变。经典热力学相变一般指平衡相变。非平衡态相变属不可逆热力学和非平衡统计范畴。另外渗流问题的几何相变,以及低维物理的 K-T (Kosterlitz-Thouless)相变、Peierls 相变属统计物理内容,请参看相关词条。

平衡相变 equilibrium phase transition　处于某外在环境某一温度的系统,因为系统中微观粒子的经典或量子的互作用,系统总趋向于有序态(见序参量词条)。但是因为温度环境的热激发,系统又有趋向于无序态的倾向。那么若外部环境不变(如压强,外磁场等),让温度缓慢变化,当一种互作用特征能量足以和热运动能量 kT 量级相比拟时,该系统就有可能发生物理性质的突变,即发生相变。同样若温度不变,而其他参量在缓慢变化,也可能产生相变。所以相变是凝聚态物理中常见现象。有形形色色的相变,如电子正常态和超导态相变,液氦的正常态和超流态相变,铁磁和反铁磁相变,反铁磁Ⅰ和反铁磁Ⅱ相变,有序无序相变、铁电与反铁电相变,金属与绝缘体相变等等。

热力学极值问题 extreme problem of thermodynamics　熵增加原理是热力学第二定律针对系统经历绝热过程从初态 i 变化到末态 f 的直接结果。即两态的熵变恒有

$$\Delta S = S_f - S_i \geqslant 0 \tag{1}$$

经典热力学定义的熵是状态函数。上式表示任何系统从初态(i)开始平衡态被破坏,系统经过不可逆过程,其内参量发生变化,最终到达末态平衡态 f,其熵恒增加。仅仅当是可逆绝热过程,末态的熵才等于初态的熵。从这个结果可以直接得到这样一个结论:孤立系统若内参量产生各种可能的变动,平衡态的熵最大。这个结论也称熵判据。粒子数不变的孤立系统所满足的数学表式应为(以 pV 系统为例):

内能不变　　$U =$ 常数　　(2)

体积不变　　$V =$ 常数　　(3)

粒子数不变　　$N =$ 常数　　(4)

在如上约束条件限制下,据熵判据若该系统处于平衡态,针对可能的内参量变化应有熵最大,即

$$S(\text{平衡态}) = S_{\max} \tag{5}$$

式(5)就是热力学极值问题最基本表式。而式(2)~(3)是式(5)的约束条件。

上列物理内容如用数学的变分形式写出来,若记 $S_{\max}$为孤立系统对应内参量为 $\xi_1^0, \xi_2^0, \cdots, \xi_i^0, \cdots, \xi_N^0$ 的熵,记

$$S_{\max} = S(\xi_1^0, \xi_2^0, \cdots, \xi_i^0, \cdots, \xi_N^0) \tag{6}$$

设该系统产生如下虚变化,其各内参量变为:

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \xi_1^0 + \delta\xi_1 \\ \xi_2 &= \xi_2^0 + \delta\xi_2 \\ &\vdots \\ \xi_i &= \xi_i^0 + \delta\xi_i \\ &\vdots \\ \xi_N &= \xi_N^0 + \delta\xi_N \end{aligned} \tag{7}$$

各内参量满足绝热等约束条件,据熵判据应有如下数学表式:

$$\begin{aligned} \Delta S = {} & S(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_i, \cdots, \xi_N) \\ & - S(\xi_1^0, \xi_2^0, \cdots, \xi_i^0, \cdots, \xi_N^0) < 0 \end{aligned} \tag{8}$$

这里式(8)就是式(5)引入虚变化概念后直接的数学结果。若将式(7)诸 ξ_i 代入式(8),并对 $\delta\xi_i$ 进行泰勒展开,式(8)可写为

$$\Delta S = \frac{1}{2!}\delta^1 S + \frac{1}{3!}\delta^2 S + \frac{1}{4!}\delta^3 S + \cdots < 0 \tag{9}$$

其中

$$\delta^1 S = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial S}{\partial \xi_i}\delta\xi_i \tag{10}$$

$$\delta^2 S = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \frac{\partial^2 S}{\partial \xi_i \partial \xi_j}\delta\xi_i\delta\xi_j \tag{11}$$

$$\delta^3 S = \sum_{i=1}^{N}, \sum_{j=1}^{N}, \sum_{k=1}^{N} \frac{\partial^3 S}{\partial \xi_i \partial \xi_j \partial \xi_k}$$

$$\times \delta\xi_i\delta\xi_j\delta\xi_k\cdots\cdots \qquad (12)$$

这里 $\delta^1 S$ 称 S 的一级变分，$\delta^2 S$ 称二级变分，等等。另据式(5)，应有

$$\delta^1 S=0 \qquad (13)$$

称该系统的平衡条件。

若 $\delta^2 S$ 不等于零，据式(8)，应有

$$\delta^2 S<0 \qquad (14)$$

式(14)称该系统稳定性条件。如果 $\delta^2 S=0$，那就有下一级变分(如三级变分)小于零。并如此类推。式(6)～(14)表示的数学方法也可用到其他约束条件的极值问题中去。如等温、等容约束条件，等温等压约束条件等(参看相关词条)。这些都属热力学极值问题。

熵判据 entropy criterion pV 系统在内能和体积不变条件下，对于各种可能变化，平衡态的熵最大。该熵判据若用热力学极值问题表示(见相关词条)，有

约束条件

$$\delta U=0,\quad \delta V=0,\quad \delta N=0 \qquad (1)$$

平衡条件

$$\delta^1 S=0 \qquad (2)$$

稳定性条件(如 $\delta^2 S$ 不为零)：

$$\delta^2 S<0 \qquad (3)$$

自由能判据 free energy criterion 系统在等温等容约束条件下，对各种可能的变动，平衡态的自由能最小。该判据是熵增加原理的结果，用虚变化表示有

$$\Delta F>0 \qquad (1)$$

相应热力学极值问题的表式有

约束条件

$$\delta T=0,\quad \delta V=0,\quad \delta N=0 \qquad (2)$$

平衡条件

$$\delta^1 F=0 \qquad (3)$$

稳定性条件(如 $\delta^2 F$ 不为零)

$$\delta^2 F>0 \qquad (4)$$

吉布斯自由能判据 Gibbs free energy criterion 吉布斯自由能判据是指系统在等温等压约束条件下，对于系统内参量各种可能的变化，平衡态的吉布斯自由能最小。

据热力学极值问题，可写为

约束条件

$$\delta T=0,\quad \delta p=0,\quad \delta N=0 \qquad (1)$$

平衡条件

$$\delta^1 G=0 \qquad (2)$$

稳定性条件(如 $\delta^2 G$ 不为零)：

$$\delta^2 G>0 \qquad (3)$$

物理和化学变化过程，常在等温等压下进行，所以吉布斯自由能判据有广泛应用。

一般平衡判据 general equilibrium criterion 一般平衡条件实际上是熵判据的推广。设想处于平衡态系统在任一类约束条件下，对于内参量各种可能的变化，我们手中没有现成的判据好利用。但是如果把该系统与相应媒质包括成一个大系统，必为孤立系统，所以其极值问题应该满足熵判据。若记系统熵为 S，媒质熵为 S_0，应有(虚变化)

$$\Delta S+\Delta S_0<0 \qquad (1)$$

对 pV 系统，若记 T_0、p_0 和 μ_0 为媒质相应的温度、压强和化学势，式(1)可写为：

$$\Delta S-\frac{\Delta U+p_0\Delta V-\mu_0\Delta N}{T_0}<0 \qquad (2)$$

该式就是 pV 系统一般平衡判据。若该式用于孤立系统，因为 $\Delta U=0$，$\Delta V=0$，$\Delta N=0$，就是系统的熵判据；等温等容系统式(2)变为自由能判据，而等温等压系统变为吉布斯自由能判据(请参看相关词条)。

式(2)还可以得到如下平衡判据：在等熵等体积约束条件(粒子数不变)，系统内能极小

$$\Delta U>0 \qquad (3)$$

等熵等压约束条件(粒子数不变)，系统焓极小

$$\Delta H>0 \qquad (4)$$

若等温约束条件(粒子数不变)，平衡判据为

$$\Delta F+p_0\Delta V>0 \qquad (5)$$

等等。

热力势 thermodynamic potential 自由能 F、吉布斯自由能 G、焓 H，内能 U 相应的热力学平衡判据可分别表示为

$$\Delta F>0$$

$$\Delta G>0$$

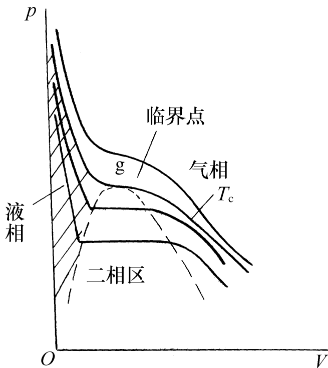
$$\Delta H>0$$

$$\Delta U>0$$

它们在相应约束条件下都为极小值。而且它们单位都是能量量纲。由于它们的物理行为类似于处于保守场中力学系统的势能，所以 F、G、H、U 都称为某一热力学系统的热力势。

***pVT* 系统　*pVT* system**　pVT 系统是指由分子组成的多体系统。分子之间的互作用表现为范德瓦尔斯(van der Waals)力形式，分子具有排斥的核心，其外有短程吸引力区。pVT 系统常见的系统是水。pVT 系统有典型的二相共存曲线，有固态、液态、气态。固态可出现若干相，液态氦可出现超流相，来源于量子效应。

临界点　critical point　临界点首先是安德鲁斯(T. Andrews)在研究二氧化碳 pV 图上等温线引入的。实际上所有 pVT 系统(参见相关词条)都有这样的性质。在 pV 图上，物质在其右边(见图)全部为气相，在最左边则为液相。而在水平线区域内是二相共存区。但是随着温度升高，二相共存区变得愈来愈窄，最后到达仅一点，高于该点温度时，二相区完全消失，该点称为临界点。安德鲁斯指出："假如有人问现在是处在气态还是液态呢？我相信这个问题不可能获得肯定的回答。"在 pV 图上经过临界点的等温线在临界点是拐点，满足如下数学关系：



常见 pVT 系统临界点示意图

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T=0 \qquad (1)$$

$$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T=0 \qquad (2)$$

在临界点系统稳定性条件为

$$\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T<0 \qquad (3)$$

系统处于临界点的温度、压强和体积(单位摩尔)分别称临界温度、临界压强和临界体积。并常用相应数学符号为 T_c、p_c 和 V_c 表示。对一种物质，上列三数值都是惟一的一个特定的值。

随相变物理的研究进展，临界点的物理概念有所发展，它不再仅限于 pVT 系统。对任何系统的某独立参量因某种物理原因变化时，而使该系统的某状态参量或它的响应函数，或甚至其再次导数在某状态图上某点发生突变，该点就称临界点。如超导体正常态与超导态转变点、液氦正常态与超流态转变点(也称 λ 点)、磁介质铁磁与反铁磁相变点都广义地称为临界点。

超临界态　supercritical state　流体系统在临界点周围，从实验手段上已很难把气、液二相区分开来，特别它们的传热性质，以及流动状态的压力降性质都有别于二相流体和气体。因而在临界点周围具有共同传热特性和流体力学特性的流体称为处于超临界态。低温流体中，如超临界氦是低温冷却技术的重要研究对象。

安德鲁斯等温线　Andrews isothermal curve　pVT 系统的 pV 图上经过临界点的等温线称安德鲁斯(Andrews)等温线。在安德鲁斯等温线以上(指温度高于 T_c)为气相区，而在安德鲁斯等温线以下会出现明显的二相共存区。

临界参数　critical parameter　临界温度 T_c、临界压强 p_c 和临界比容 V_c 统称为临界参数。

如二氧化碳其临界参数为

$$T_c=204.04\text{K}$$

$$p_c=73\times10^5\text{Pa}$$

$$V_c=2.17\text{cm}^3/\text{g}$$

水之临界参数为

$$T_c=647.15\text{K}$$

$$p_c=221.2\times10^5\text{Pa}$$

$$V_c=3.28\text{cm}^3/\text{g}$$

临界温度 critical temperature 参见"临界点与临界参数"。

临界压强 critical pressure 参见"临界点和临界参数"。

临界比容 critical specific volume 参见"临界点和临界参数"。

范德瓦尔斯方程临界参数 critical parameters of Van der Waals equation 范德瓦尔斯(Van der Waals)方程描述 pVT 热物理性质远优于理想气体物态方程。它不仅能比较精确地描述系统的气体状态,而且还能反映气液共存二相区和液态的行为。在临界点,据过该点等温线出现拐点性质(参见临界点词条(1)、(2)两式)。可以得出范德瓦尔斯方程三临界参数与该方程两特征参量 a、b 和理想气体常数 R 之间的关系:

临界比容 $$V_c=3b \tag{1}$$

临界温度 $$T_c=\frac{8a}{27Rb} \tag{2}$$

临界压强 $$p_c=\frac{a}{27b^2} \tag{3}$$

并且有

$$\frac{RT_c}{p_cV_c}=2.667 \tag{4}$$

对比方程 reduced equation 范德瓦尔斯方程

$$\left(p+\frac{a}{V^2}\right)(V-b)=RT \tag{1}$$

中,a、b 为各种气体的特征参量。为了消除这种表面的特征性,利用范德瓦尔斯方程临界参数与 a、b 特征参量关系(参见相关词条),定义如下无量纲变量

$$\theta=\frac{T}{T_c} \tag{2}$$

$$\omega=\frac{p}{p_c} \tag{3}$$

$$\varphi=\frac{V}{V_c} \tag{4}$$

可将范德瓦尔斯方程写为不明显含 a、b 两气体特征参量的对比方程,

$$\left(\omega+\frac{3}{\varphi^2}\right)\left(\varphi-\frac{1}{3}\right)=\frac{8}{3}\theta \tag{5}$$

无量纲量 θ、ω 和 φ 分别称为对比温度、对比压强和对比体积、范德瓦尔斯因这方面工作的成就获 1910 年度诺贝尔奖。

对比温度 reduced temperature 参见"对比方程"词条。

对比压强 reduced pressure 参见"对比方程"词条。

对比体积 reduced volume 参见"对比方程"词条。

对比定律 reduced law 据范德瓦尔斯方程的对比方程

$$\left(\omega+\frac{3}{\varphi^2}\right)\left(\varphi-\frac{1}{3}\right)=\frac{8}{3}\theta$$

可见,当两种气体有两个对比参量(如对比温度和对比体积)数值相等,那么另一个对比参量(如对应压强)也一定相等,这结果称对应态律,或对比定律。

布拉格-威廉方程 Bragg-William equation 据平均场理论可求导出磁介质铁磁相或反铁磁相物态方程为

$$\frac{\mu_0\boldsymbol{H}}{kT}-\frac{n\varepsilon M}{kT}=\tanh^{-1}M$$

μ_0 为真空磁导率,H 为外磁场,n 为格点最邻近数,ε 为邻近粒子互作用能,对铁磁体,$\varepsilon>0$,反铁磁体 $\varepsilon<0$。k 为玻尔兹曼常数,$\boldsymbol{M}$ 为磁化强度。

利用该式,可以讨论铁磁体自发磁化现象,因而在热力学中它是继范德瓦尔斯方程后相当有意义的方程。

凝聚态 condensed state 物质处于凝聚态,是指它以结晶晶体、非晶体、液态或等离子态等状态存在。在这类状态系统中的粒子之间互作用都较强烈。

欧仑菲斯特相变理论 Ehrenfest phase transition theory 多体系统具有形形色色的相变现象。1933 年欧仑菲斯特(Ehrenfest)首先用热力学唯象理论研究这些相变现象的变化规律,他用化学势在相变前后的一阶导数、二阶导数,直到 n 阶导数的不连续性把各种相变现象进行分类。平衡相变总是在相平衡条件下进行的,所以系统在相变过程中两相的化学势总是相等的。欧仑菲斯特发现,有一类相变是

化学势一阶导数所对应的物理量发生突变，或两相的化学势函数一阶导数不连续，他称这类相变为一级相变。如果在相变点，化学势一阶导数连续，而是其二阶导数所对应的物理量产生突变，即二相的化学势二阶导数不连续，称二级相变。依次类推，n 级相变，是在相变点化学势到 $n-1$ 阶导数都连续，出现 n 级导数不连续。也有些相变现象不符合欧仑菲斯特相变理论，如液氦正常态到超流态的 λ 相变。

一级相变 first order phase transition 据欧仑菲斯特(Ehrenfest)相变理论，一级相变是在相变点两相化学势的一次导数数值不等，即相变过程中产生突变。对于均匀系统(单组元)，化学势就是单位摩尔的吉布斯自由能。对于 pV 系统，摩尔熵和摩尔体积就是吉布斯自由能的一次导数，即

$$S=-\left(\frac{\partial g}{\partial T}\right)_p \tag{1}$$

$$V=\left(\frac{\partial g}{\partial p}\right)_T \tag{2}$$

所以一级相变的重要特点是相变前后熵发生突变，因而产生潜热。并且二相平衡曲线的斜率为克拉珀龙方程表式(参看热学相关词条)所描述。

对于处于外磁场 H 下的Ⅰ类超导体，在相变点也为一级相变，但它是电磁系统，相变过程是熵与磁化强度产生突变，也伴随有潜热。

克拉珀龙方程 Clapeyron equation 一级相变二相共存曲线斜率方程为克拉珀龙方程。以 pVT 系统为例。克拉珀龙方程为

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T}=\frac{S^\beta-S^\alpha}{V^\beta-V^\alpha} \tag{1}$$

这里 S^α 和 S^β 为二相共存时 α 相或 β 相摩尔熵，V^α 和 V^β 为二相共存时 α 相或 β 相摩尔体积。

因为潜热定义为

$$L=S^\beta-S^\alpha \tag{2}$$

所以克拉珀龙方程又可写为

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T}=\frac{L}{T(V^\beta-V^\alpha)} \tag{3}$$

外场不为零Ⅰ类超导体克拉珀龙方程据式(1)类比可写为

$$\frac{\mathrm{d}H_c}{\mathrm{d}T}=\frac{S_n-S_s}{\mu_0 H_c}$$

H_c 为临界磁场，S_n 和 S_s 分别为超导正常态和超导态单位体积熵，μ_0 为真空磁导率。

二级相变 second order phase transition 二级相变是某系统在相变点相变过程前后化学势及其一次导数相等，而其二次导数相关的物理量产生突变。对均匀的 pV 系统，化学势二次导数相关物理量有定压比热 C_p，膨胀系数 α 和压缩系数 κ，即

$$C_p=-T\left(\frac{\partial^2\mu}{\partial T^2}\right)_p \tag{1}$$

$$\kappa=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial^2\mu}{\partial p^2}\right)_T \tag{2}$$

$$\alpha=\frac{1}{V}\frac{\partial^2\mu}{\partial T\partial p} \tag{3}$$

这里 μ 为化学势。

二级相变相平衡曲线的斜率不再满足克拉珀龙方程，而是满足欧仑菲斯特方程(参见相关词条)。

欧仑菲斯特方程 Ehrenfest equation 欧仑菲斯特方程是具有二级相变特性的二相系统相平衡曲线斜率的表式。因为二级相变前后是化学势二次导数产生突变。若记二相定压比热变化为 ΔC_p，膨胀系数变化为 $\Delta\alpha$，压缩系数变化为 $\Delta\kappa$，那么欧仑菲斯特方程为：

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T}=\frac{\Delta C_p}{TV\Delta\alpha} \tag{1}$$

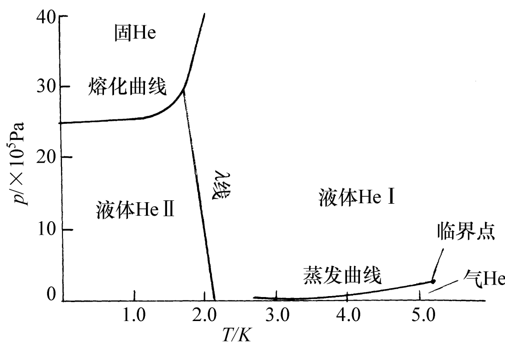
$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T}=\frac{\Delta\alpha}{\Delta\kappa} \tag{2}$$

其中式(1)是二级相变熵为连续函数的结果。式(2)是二级相变体积为连续函数的数学结果。

高级相变 higher order phase transition 据欧仑菲斯特相变理论(参见相关词条)，凡二级相变以上的相变，总称为高级相变。例如理想玻色(Bose)气体无序相到有序相玻色凝聚相变就是三级相变。

λ 相变 λ-phase transition 液氦正常相(常称氦Ⅰ)与超流相(常称氦Ⅱ)之间的相变称 λ 相变。其原因是液氦超流相变不是一级相变，在相变点液氦的熵与比容都无突变。而在现在的测温度的精确范围内，氦Ⅰ与氦Ⅱ比热在

相变点都趋向于发散方向变化，不能肯定比热在相变点是连续、跃变还是发散，所以难以用欧仑菲斯特相变理论判断液氦超流相变的级数。又因为在氦的 p-T 相图上、液氦与气相相平衡曲线，与氦Ⅰ氦Ⅱ的相平衡曲线共同构成如倒写的希腊字母“λ”，故称液氦的超流相变为 λ 相变。见下图。



氦(^{4}He)的 p-T 相图

连续相变 continuous phase transition 欧仑菲斯特理论定义的一级相变是系统的热力学化学势的一次导数在相变点不连续，这类相变在相变过程中可能出现二相共存，以及相变前后的对称性也不一定都有突变。连续相变是指系统化学势一次导数在相变点连续变化的那一类相变。它包括二级相变、高级相变及 λ 相变等。连续相变有如下物理特征：(1)无二相共存区；(2)相变时无潜热和体积(或相应物理量)效应；(3)相变前后系统对称性必然产生突变。

序参量 order parameter 序参量是一个特定的热力学参量。它也是温度 T 和压强 p(或其他热力学参量)的单值函数。它甚至在某特定外场下可为空间坐标的函数(如超导或超流处于涡旋态)。它的引入是经典热力学理论一个重大的发展，是朗道对热力学理论的重要贡献。序参量是建立朗道相变理论的基本参量，它直接反映系统在连续相变前后的对称破缺。序参量为零对应系统处于高对称性有序度低的无序相。而在临界温度以下，序参量描述高有序度的有序相。故序参量将从临界温度 T_c 开始随温度下降其数值从零变化到非零值。序参量也和其他热力学参量一样反映不同系统的内部特性。对于自发磁化的磁介质，磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 就是序参量，这与通常磁介质热力学参量是一致的。在气液相变临界点，因为要保证无序相序参量为零，取液相密度与气相密度差 $\rho_{液}-\rho_{气}$ 为序参量。对于具有强烈宏观量子效应的超导或超流态，序参量取宏观波函数 ψ。

朗道相变理论 Landau phase transition theory 朗道相变理论不同于欧仑菲斯特相变理论，它不是对形形色色的相变现象进行分类，而是借助于序参量对所有连续相变的有序相在临界点附近写出吉布斯函数的级数展开形式。以仅一个序参量为 η 为例，其吉布斯自由能 G 为

$$G(T,\eta)=G_0(T)+\alpha\eta^2+\beta\eta^4 \qquad (1)$$

其中 $G_0(T)$ 是无序相的自由能。式(1)中参数 α 在有序相为负，无序相为正，可写为

$$\alpha=\frac{\partial\alpha}{\partial T}(T-T_c) \qquad (2)$$

T_c 为临界温度。β 为大于零的数。

$$\beta>0 \qquad (3)$$

式(1)、(2)、(3)就是朗道相变理论的核心内容。因为朗道相变理论形式上写出了有序相吉布斯自由能的解析形式，因而借热力学理论帮助，有广泛而重要的应用。

多元多相系统相平衡条件 phase equilibrium conditions of phase equilibrium of heterogenous system composed of many constituents 多元多相系统相平衡条件研究范围总是限制在组元之间无化学反应的多元多相系统。其相平衡条件物理内容是在温度 T 和压强 p 已达平衡的前提下,同一组元在各相的化学势相等。如用数学表式写出来,多元多相系统第 i 个组元在 k 个相中化学势满足如下等式

$$\mu_i^1 = \mu_i^2 = \cdots = \mu_i^j = \cdots = \mu_i^k$$

$$(i = 1, 2, \cdots, \sigma)$$

这里 σ 指该多元多相系统有 σ 个组元。

吉布斯-杜安关系 Gibbs-Duhem relation 处于平衡态的多元多相系统,第 i 组元在第 j 相中的化学势 μ_i^j 是粒子数的零次齐次函数。据此原理可求得在 j 相第 i 到 σ 个组元有下列关系

$$\sum_{i=1}^{\sigma} n_i^j \mathrm{d}\mu_i^j = 0$$

该式称吉布斯-杜安关系。

吉布斯相律 Gibbs rule 一个 σ 个组元,k 个相无化学反应的多元多相系统,在处于相平衡条件下,能保持 k 个相共存前提下系统可能变化的最大参量数目,称该多元多相系统的自由度 f。其 f 的数值满足下式:

$$f = \sigma - k + 2$$

该式数值关系称吉布斯相律。

系统处于相平衡的要求条件要比系统处于平衡态宽,例如单元二相系统在温度 T 和压强 p 一定时,在 pV 图上二相共存区等温线为平行于温度轴的线段,它包括很多平衡态。但是它们在 p-T 图上,这个线段仅对应一个点。

多元多相系统自由度 degree of freedom of heterogenous composed of many constituents 多元多相系统自由度就是在保证多元多相系统在相平衡条件下可变化参量的数目(参见吉布斯相律)。其数值就是吉布斯相律中的 f,对 σ 个组元 k 个相无化学反应系统

$$f = \sigma - k + 2$$

自由度对用实验方法寻找相图起重要作用。例如对单元二相系统,$f=1$,所以该系统相平衡自由度是 1。在相平衡条件下,单元二相系统参量都是某一个参量的函数。若选该参量为温度 T,那么相平衡成立时压强 p 仅为温度 T 之函数。这样人们就可以用 p-T 图来描绘单元二相系统的相图。

相图 phase diagram 热力学相图是以吉布斯相律为选取自由度的依据,以相平衡曲线(三维相图为曲面)把该系统可能出现的若干相描述出来的坐标定量图形为该系统的相图。例如水的 p-T 图是典型的相图。

三相点 triple point 据吉布斯相律,单元三相系统处在三相共存时,因为 $\sigma=1, k=3$,有

$$f = 0$$

即单元三相系统自由度为零,也就是单元三相系统之相共存条件仅仅是惟一的一个点。这种三相共存的苛刻条件在热力学方法上正好用于选定温标的固定点(参见低温技术相关词条)。

二元相图 two constituent phase diagram 据吉布斯相律,二元系相共存的自由度有四种可能选取的数值(参见多元多相系统自由度):

二元单相系 $k=1, f=3$

二元二相系 $k=2, f=2$

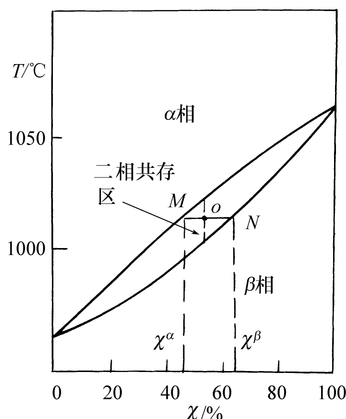
二元三相系 $k=3, f=1$

二元四相系 $k=4, f=0$

可见,热力学若要描述二元系统单相的状态,因为自由度 $f=3$,因而要三个独立变量描述。一般选温度 T、压强 p 和一个组元的组分 χ。在 T-p-χ 三维空间中,二元系不同的相占领一定的区域,各个区域之间以曲面分开,这类曲面就是二相共存曲面。对应自由度 $f=2$ 的二元二相系。其中两个曲面相交曲线,是三相共存线,$f=1$。三个曲面相交点,表示四相共存,$f=0$ 对应二元四相系。这一个点,称四相点。

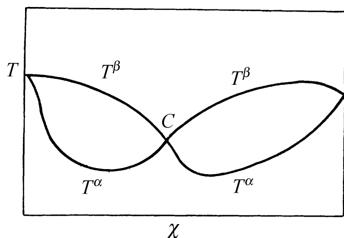
因为用三维坐标表示相图在阅读中有困难,所以在实用上常用在特定压强下(如大气压下)作二元系的 T-χ 图。如各种二元合金图,二元气液图。

下图为金银合金常压下的 T-χ 图,这里 χ 是金的组分。在图中被两曲线划分成三个区,液相 α 区、固相 β 区以及两曲线包成的二相共存区。



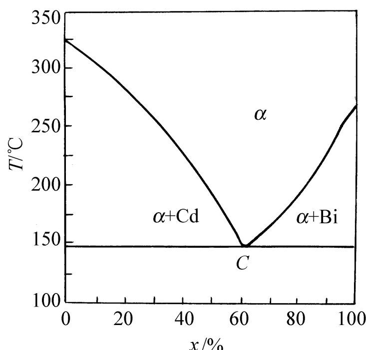
金银合金常压下 T-χ 图,
χ为金组分

共沸点 Azeotropic point 二元系相图具体形式现在理论很难预言,情况很复杂。具体材料相图只能由实验结果确定。如图所示为气液共存二元二相相图的一种典型类型。图中以 χ 表示 A 组元组分。T^{β} 和 T^{α} 分别代表二相共存区所包的边界。T^{β} 以上是二元系气相,T^{α} 以下是二元系液相。在图中 C 点是一个特殊点,在该点(指某特定压强和某一特定温度下)二元系的气相与液相两组元分别在气相和液相中相遇(即数值相等),该点称该二元系的共沸点。共沸现象在空调技术中有应用。



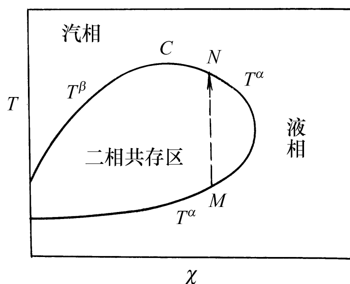
二元系存在共沸点(C 点)相图

低共熔点 eutectic point 如图为镉(Cd),铋(Bi)合金二元系相图。图中 χ 表示在液相(α相)镉的组分。在过 C 点与横轴平线以下表示纯镉纯铋固相无条件分别存在的区域。倒写"λ"字线上方是液相,在 C 点左边平行线与倒"λ"字线所包区域为纯镉固相与二元液相共存区。C 点右边二线所包区为铋固相与二元液相共存区。C 点是三相点(镉固相、铋固相和镉铋合金液相),该点称低共熔点。



镉(Cd)铋(B)合金相图

倒退凝结 inverse condensation 如图,图中 T^{α} 与 T^{β} 线包成二元系的二相共存区,它们在 C 点相遇。T^{β} 以上是二元系气相,在 T^{α} 线所包区域外为液相。若该二元系从 M 点沿 MN 方向进入二相共存区。当到达 N 点时,该二相又回到液相,称倒退凝结。



倒退凝结图

四相点 four phase coexistence point 二元系相图中四相共存点,其自由度 $f=0$,是在 T-p-χ 三维空间中三个二相区曲面的相交点,称四相点(参看二元相图词条)。

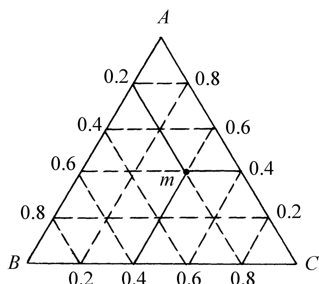
杠杆原理 lever principle 在二元系的 T-χ

图上，存在二相共存区（参见“二元相图”词条中金银合金图）。在该图的 O 点，二元系存在二相。图中 O 点对应横坐标 χ 数值，它代表整个系统金的组分，而金银合金液相金组分在 M 点，对应横轴 χ^{α} 数值。图中 N 点是固相中金的组分 χ^{β}。所谓杠杆原理是指在 O 点二相系处于 α 相的质量 m^{α} 和处于 β 相质量 m^{β} 之比例满足如下类似于杠杆力矩平衡数学关系，即：

$$\frac{m^{\alpha}}{m^{\beta}}=\frac{\overline{ON}}{\overline{OM}}$$

三元系相图 phase diagram of three constituents system 据吉布斯相律（参见相关词条），三元系单相系统，独立变化自由度应该四个，而三元系二相共存系统自由度应该是三个。因为用四维空间描述相图有困难，所以三元系相图还是采用二维平面图形。采取的办法是预先选定压强 p 和温度 T 具体数值。这样三元系单相只有两个变量，三元二相平衡仅剩一个可变量。这种方案用平面三角形图可以完成。我们选三元系三组元的组分为三角形的边，因为组分 x_1, x_2, x_3（这里下标 1、2、3 相对三个不同组元）的最大值都是 1，所以该三角形刚好选等边三角形。并且在每一个边上可以均分刻度，可取十等分（如下图）。

在三元系三角图形中任一个点，代表一组确定的（x_1, x_2, x_3），这就是对应三元系的某一个平衡状态。如在图中 m 点，其 $x_1=0.2$, $x_2=0.4$, $x_3=0.4$。



三元系相图组分表示方案

由于三元系的相图很复杂，如上固定压强和温度方案对相图描述在一些情况下会带来困难。因为相图是实际测量的结果，所以实际采用描述相图方案常是仅选定压强（如合金常用标准大气压），而采用在三角图中实验定出等温线，利用这些等温线还可以定出二相共存曲线，这类相图有利实际应用。

相平衡曲线 phase equilibrium curve 对于 pVT 具有一级相变性质的系统，相平衡曲线就是在 p-T 图上的二相共存曲线。理论上对单元二相系统，它就是二相的单位摩尔吉布斯函数（如两个相都为固相，忽略体积效应，可选单位体积）相等时，即

$$g^{\alpha}(T,p)=g^{\beta}(T,p)$$

具体的函数表式。这里上标 α 和 β 分别表示 α 相与 β 相。一般情况，凝聚相的吉布斯函数难于解析求导，所以相平衡曲线具体形式主要依靠实验测量，而不是解析求导 g^{α} 和 g^{β} 函数。

对于具有连续相变性质的系统，因为并不具有二相共存区，相平衡曲线实际上是临界点在 p-T 图（压强也可换为磁场 H 等其他广义力参量）上的曲线，在该曲线当然也满足式（1）的相平衡条件。

相平衡比热 heat capacity of phase equilibrium 在二相共存的条件下，二相系统沿相平衡曲线升高一度在某一相（设 α 相）单位质量所吸收的热量（也可能放热）数值称该相的相平衡比热。α 相相对 β 相相平衡比热表示为

$$C^{\alpha}_{\beta}=T\left(\frac{\mathrm{d}S^{\alpha}}{\mathrm{d}T}\right)_{\text{二相平衡}} \tag{1}$$

或对 pVT 系统可写为

$$C^{\alpha}_{\beta}=C^{\alpha}_{p}-T\left(\frac{\partial V^{\alpha}}{\partial T}\right)_{p}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T} \tag{2}$$

蒸气压曲线 vapor pressure curve 蒸气压曲线是指某液相与气相处于二相共存时相平衡曲线。特定液体的蒸气压曲线是由实验测量所确定的。若把与液相处于相平衡的气相近似视为理想气体，并作一些近似处理可写出蒸气压曲线一般粗略形式

$$\ln p=A-\frac{B}{T}+C\ln T$$

式中 A, B, C 是待定常数。

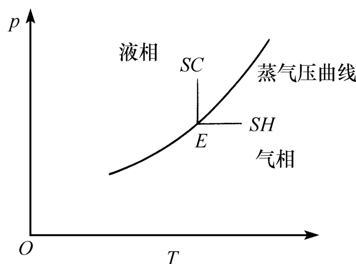
固化曲线 solidifying curve 某系统固相与液相相平衡曲线就为固化曲线。该曲线也可

称熔解曲线。一般对于大块系统,这两曲线是一条曲线。但是对所谓几何体约束系统,如约束在石墨片上的液氦膜,或在微孔中约束的液氦,固液共存的降温曲线和升温曲线不重合,有所谓回滞现象。所以习惯上把降温的固液相平衡曲线称固化曲线,升温的固液相平衡曲线称熔化曲线。

熔化曲线 melting curve 见“固化曲线”。

升华曲线 sublimate curve 某系统固相与气相相平衡曲线称升华曲线。

过热液体 superheated liquid 在 p-T 图上表示某 pVT 系统一条蒸气压曲线。在该曲线上任一点是该系统气液处于二相平衡状态。该曲线上方为纯液相,下方为纯气相。若某种液相在相平衡状态 E 点被缓慢加热,见图,使该液体状态从 E 点等压地升温到 SH 点仍能保持液体状态。那么在 E-SM 直线上所有状态都是该液体处于过热液体状态。过热液体状态是亚稳态,范德瓦尔斯方程也能预言这种状态可能存在。



过热液体与过冷液体 p-T图

过冷气体 supercooled gas 在过热液体词条图中(参见过热液体词条),若将处于气液二相平衡的气相缓慢等温地加压沿 E-SC 直线到达 SC 点仍能保持气体状态而不转变成液相。那么,处于 E-SC 直线上所有状态称过冷气体。过冷气体也称过饱和气,是亚稳态。范德瓦尔斯方程预言了该状态可能存在。

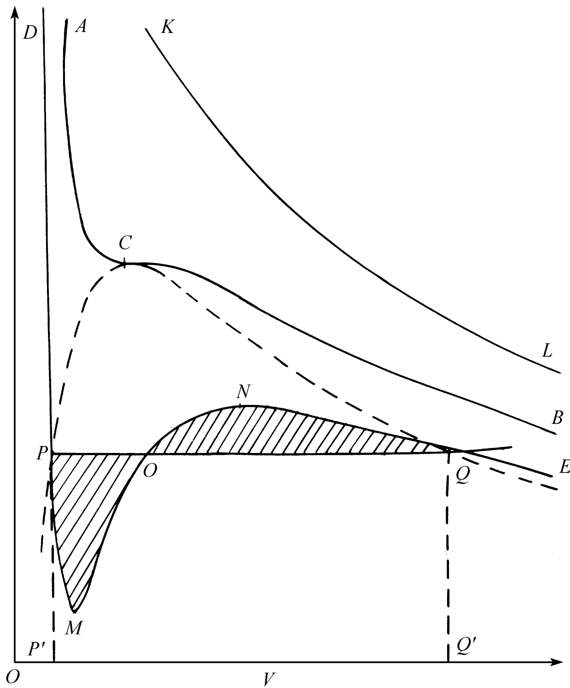
饱和蒸气压 saturated vapor pressure 气液处于二相平衡,据相平衡条件,压强仅为温度 T 的函数,该函数就是在“过热液体”词条图上的蒸气压曲线。所谓饱和蒸气压就是气液二相处于相平衡时的压强。

过饱和蒸气压 supersaturated vapor pressure 若某气体系统,其温度已达到气液二相平衡的温度,而压强大于饱和蒸气压,但是它还处于过冷气体状态,称该压强为该过冷气体的过饱和蒸气压。气体处于过冷状态(或称过饱和状态)常见有两种物理情况,一是气体中液体凝聚核半径过小,或是气液交界面是曲面。

麦克斯韦法则 Maxwell rule 真实气体在 p-V 图上的等温线在气液二相共存区为平行于 V 轴的直线(见图)。若以范德瓦尔斯方程选择 a、b 两参量拟合该真实气体等温线在二相区将成英文字母 S 形。如图中 $PMONQ$曲线所示。图中 PQ 线段为真实气体在二相区的等温线。所谓麦克斯韦等面积法则是指在该 pV 图上 $POMP$ 与 $ONQO$ 两闭合曲线所包围的面积相等。该结果最简单证明是用热力学第二定律原理要求可逆等温循环过程 PO-$QNOMP$ 对外做功为零。即:

$$\oint_{POQNOMP} đW = 0$$

麦克斯韦作图法 Maxwell drawing diagram method 据麦克斯韦等面积法则(参见“麦克斯韦等面积法则”词条中图),如果我们已知范德瓦尔斯方程经过二相区的等温线,现在要用作图方法决定真实气体在相同温度在二相区中二相共存水平线位置(即在“麦克斯韦等面积法则”词条中图中的$\overline{POQ}$线段)。我们只要依据麦克斯韦等面积法则,让找出的$\overline{POQ}$线使 $PMOP$ 和 $OQNO$ 两个闭合曲线所包围的面积相等就可以了。这就称麦克斯韦作图法。



麦克斯韦法则真实气体 p-V 图上等温线

负压强区 negative pressure region 在“麦克斯韦法则”词条图中，DPM 是范德瓦尔斯方程描绘的真实气体液相等温线。其中 DP 段表征普通液体，而 PM 线段，是描述该液体可能出现的过冷液体状态，是亚稳态。PM 线段对应的压强区称负压强区。

液滴临界半径 critical radius of liquid drop 半径为 r 的液体球与其气相只有一个特定的半径 r_c 才能二相共存。其 r_c 的数值用热力学理论可证明近似为下式所决定

$$r_c = \frac{2\sigma V^{\alpha}}{RT\ln\frac{P^{\beta}}{P_{\infty}}}$$

式中 σ 为液滴的表面张力，V^{α} 为液体的比容，P^{β} 为与液滴共存气相的过饱和蒸气压，P_{∞} 为该液体的饱和蒸气压。

r_c 称为液滴的临界半径。若某液滴半径 r 小于 r_c，该液滴不能存在，而是逐步蒸发消失。若某液滴半径 $r > r_c$，该液滴也不稳定，而是逐步增大，不可能气液两相共存。液滴相平衡模型表征的物理机理，在物理学唯象理论中十分重要，它有助于讨论很多物理现象。常称“液滴模型”。

蒸发 evaporation 若液体与其未达饱和蒸气压的气相共处于一容器中时，液体在两相的接触面将气化。该过程就称液体的蒸发过程。该蒸发过程要一直进行到在液体温度 T 下，气相达到饱和蒸气压。如果该容器被绝热，蒸发过程会引起温度下降。

沸点 boiling point 严格讲，沸点并不是热力学理论术语。在 pVT 系统 p-T 图的蒸气压曲线上，选定压强 p 之后，在该曲线上 p 所对应的温度 T 就是该液体在压强 p 的沸点。从这点意义上讲，如果我们描述蒸气压曲线若采

用变量 p,那么蒸气压曲线可将 T 表示为 p 的函数,$T=T(p)$。T 就是在 p 时的沸点。在习惯上指某种液体的沸点,有时被称为正常沸点,是指压强为标准大气压(=101325Pa=760mmHg)时蒸气压曲线上所对应的温度。然而值得注意的是,如果液体纯洁,容器表面光滑,液体有可能在正常沸点时观察不到气泡翻腾的沸腾现象。该液体可成为过热液态。

沸点升高 boiling point elevation 若液体中溶解有杂质,设这时溶剂(指原液体)组分为 χ,据稀溶液理论(参见相关词条),掺杂后溶液的沸点升高的数值 ΔT 近似可用下式表示:

$$\Delta T=\frac{RT^2}{L}\chi \tag{1}$$

其中 L 为液体的潜热。

一般情况(不一定是稀溶液),式(1)写为

$$\Delta T=K\chi \tag{2}$$

其中 K 称沸点升高常数。

凝固点降低 freezing point depression 在溶剂中存在非挥发性溶质,设溶剂组分为 χ,据稀溶液理论可以证明该溶液凝固点温度下降 ΔT 的数值可用下式求得:

$$\Delta T=\frac{RT^2}{L}\chi$$

L 为溶剂的潜热。

熔点 melting point 在一定压强下,晶体与其液相共存的温度称溶点(类似于沸点)。但是人们习惯上常指在标准大气压下(101325Pa)固体转变成液态的温度为熔点。在固定压强下,一些纯金属熔点严格固定,可以复现。所以常用某些金属熔点定义温标的固定点。

凝结 solidification 气相向液相的转变现象称凝结。

露点 dew point 空气中水蒸气达饱和蒸气压时的温度称该空气的露点。

凝华 sublimation 气相直接转变成固相的过程称凝华。

湿度 moisture 这是在空调行业中常用的热力学参量,是指气体中含水组元的密度。所谓气体的绝对湿度就是指该气体单位体积中水气的质量,单位可选为 kg/m^3。相对湿度是指大气所含水分的质量与在同样温度和压强下水分压达饱和蒸气压之质量的比值。

比湿度是指单位质量大气中水气的质量。

升华热 latent heat of sublimation 指固相相变到气相的潜热。

汽化热 latent heat of vaporization 指液相相变到气相之潜热。

易逸度 fugacity 若将混合非理想气体某组元 i 的化学势强行写为

$$\mu_i=RT(\varphi_i+\ln p_i^*) \tag{1}$$

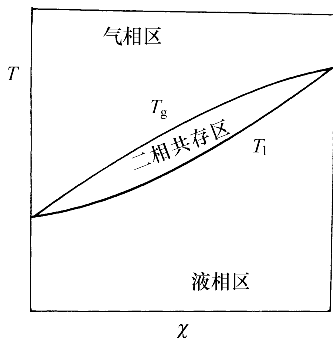
其中 p_i^* 为:

$$RT\ln p_i^* = RT\ln\frac{n_iRT}{V}+2\sum_j\frac{B_{ij}n_j}{V}+3\sum_{ij}\frac{C_{ijl}n_jn_l}{2V^2}+\cdots \tag{2}$$

这里 n_i 为第 i 组元物质的量,B_{ij},C_{ijl}为温度函数。

p_i^* 称易逸度,物理含义是气相与其凝聚相达到相平衡时,凝聚相中第 i 个组元向气相逃逸的程度。

气线 gas line 下图为典型的二元系在固定压强下的相图(参见二元系相图词条)。在 T_g 线以上为二元气相区,在 T_l 以下为二元液相区,T_g 和 T_l 所包区域为二相共存区。热力学称 T_g 线为气线,T_l 线为液线。



液线 liquid line 参见“气线”词条。

四、化学热力学
Chemical Thermodynamics

混合理想气体化学势　chemical potential of mixing perfect gas　由不同分子或原子组成的气体若满足道尔顿(Dalton)定律(参见相关词条)称混合理想气体,即有

$$p = \sum_{i=1}^{\sigma} p_i \tag{1}$$

p 为气体的总压强,p_i 是第 i 组元的分压强。其中 p_i 满足独立的理想气体物态方程形式

$$p_i = n_i \frac{RT}{V} \tag{2}$$

这里 n_i 为第 i 个组元的物质的量,V 为该混合理想气体体积。

该混合理想气体第 i 个组元的化学势为:

$$\mu_i = RT[\varphi_i(T) + \ln p + \ln \chi_i] \tag{3}$$

其中 $\varphi_i(T)$ 为

$$\varphi_i(T) = -\frac{1}{R}\int \frac{\int c_p^i \mathrm{d}T}{T^2}\mathrm{d}T + \frac{h_{oi}}{RT} - \frac{S_{oi}}{R} \tag{4}$$

其中 c_p^i 为第 i 个组元定压比热,h_{oi}和 S_{oi}分别表示第 i 个组元的摩尔焓和摩尔熵。χ_i 为第 i 个组元的组分。并满足归一条件。

$$\sum_{i=1}^{\sigma} \chi_i = 1$$

混合熵　entropy of mixing　不同组元的理想气体起初在同一温度 T 和压强 p 分别以隔板分割各自存在,然后隔板打开让其相互自由扩散所产生的熵增加量为混合熵。对 σ 个组元的混合理想气体,混合熵表式为

$$\Delta S = -\sum_{i=1}^{\sigma} n_i R \ln \chi_i \tag{1}$$

n_i 为第 i 个组元的物质的量,χ_i 为第 i 个组元的组分。

吉布斯佯谬　Gibbs paradox　美国理论物理学家吉布斯注意到在理想气体混合熵表式中(参见混合熵),有

$$\Delta S = -\sum_{i=1}^{\sigma} n_i R \ln \chi_i \tag{1}$$

而该式并没有明显指出不同隔板内粒子的种类。只要它们是不同的,隔板打开到新平衡态时就有熵增加 ΔS。设想隔板打开前为全同粒子,尽管隔板打开后因为全同粒子此举已失去物理意义,但是据式(1)仍有 ΔS 数值。可是从物理机理考虑 ΔS 应该是零。这称吉布斯佯谬。解决吉布斯佯谬是要考虑微观粒子的全同性,在统计物理中可给予解释。

质量作用定律　law of mass action　在某一温度与压强(T, p)下,具有如下化学平衡方程

$$\sum_{i=1}^{\sigma} \nu_i A_i = 0 \tag{1}$$

的混合理想气体,其化学平衡条件可明显表示为

$$\prod_{i=1}^{\sigma} p_i^{\nu_i} = K(T) \tag{2}$$

或

$$\prod_{i=1}^{\sigma} \chi_i^{\nu_i} = K(T, p) \tag{3}$$

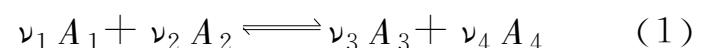
其中

$$K(T, p) = K(T)\, p^{-\sum_{i=1}^{\sigma} \nu_i} \tag{4}$$

式(2)或(3)称质量作用定律。ν_i 为化学平衡常数,A_i 为化学反应的反应物或生成物。$K(T, p)$称化学反应平衡常数,$K(T)$称化学反应定压平衡常数。

化学反应平衡常数　equilibrium constant of chemical reaction　化学反应平衡常数 $K(T, p)$或定压化学反应平衡常数定义见质量作用定律词条。这两个量是可以测量的。

反应度　degree of reaction　反应度是反映一个具体化学反应的活性程度。以下列四个化学成分 A_1, A_2, A_3, A_4 反应为例:



$$\nu_1 A_1 + \nu_2 A_2 \rightleftharpoons \nu_3 A_3 + \nu_4 A_4 \tag{1}$$

该式中 ν_1, ν_2, ν_3, ν_4 为化学平衡系数。该式右边为生成物,左边为反应物。

设该化学反应初始投料各化学成分的物质的量分别为

$$\begin{array}{lll} A_1 & \text{初始为} & N_0|\nu_1| \text{摩尔} \\ A_2 & \text{初始为} & N_0|\nu_2| + N_2 \\ A_3 & \text{初始为} & N_0'\nu_3 \\ A_4 & \text{初始为} & N_0'\nu_4 + N_4 \end{array} \tag{2}$$

这里 ν_1 和 ν_2 用绝对值是因为 A_1, A_2 为反应

物，它们是负值。

引进反应度 ξ，表示出该化学反应到达平衡时，A_1，A_2，A_3 和 A_4 的物质的量，应为：

A_1 平衡时

$$N_1=(N_0+N_0')|\nu_1|(1-\xi)$$

A_2 平衡时

$$N_2=(N_0+N_0')|\nu_2|(1-\xi)+N_2$$

A_3 平衡时

$$N_3=(N_0+N_0')\nu_3\xi$$

A_4 平衡时

$$N_4=(N_0+N_0')\nu_4\xi+N_4 \qquad (3)$$

利用式(3)的第一式，可以清楚看出反应度 ξ 的物理意义。从该式可解得

$$\xi=\frac{(N_0+N_0')|\nu_1|-N_1}{(N_0+N_0')|\nu_1|} \qquad (4)$$

结合式(2)的第一式可从该式看出，反应度 ξ 是表征 A_1 反应了的物质的量 $(N_0+N_0')|\nu_1|-N_1$ 与 A_1 最大的物质的量 $(N_0+N_0')|\nu_1|$ 之比。

分解度 degree of resolution 就是分解化学反应的反应度(参见“反应度”词条)。

反应热 reaction heat 任何一种化学反应或热核反应都是反应物在等温、等压条件下转变成生成物的过程。那么所有生成物的总焓与所有反应物的总焓之差就是该化学反应或核反应的反应热。

在数值上，若某化学反应或核反应的反应方程为

$$\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i A_i=0 \qquad (1)$$

其中 ν_i 为化学平衡系数。该方程 A_i 为生成物，$\nu_i>0$，A_i 为反应物 $\nu_i<0$。那么反应热 ΔH 为

$$\Delta H=\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i h_i \qquad (2)$$

h_i 为化学成分 A_i 的摩尔焓。

范托夫方程 Van′t Half equation 范托夫方程是联系定压化学反应平衡常数 $\kappa(T)$(参见化学反应平衡常数词条)，与反应热 ΔH 之间的方程，

$$\frac{d\ln\kappa(T)}{\mathrm{d}T}=\frac{\Delta H}{RT^2}$$

因为 $\kappa(T)$ 是可以测量的，所以用范托夫方程可测量某化学反应的反应热。

能斯特方程 Nernst equation 对于具有 σ 个组元气相化学反应

$$\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i A_i=0 \qquad (1)$$

的定压化学平衡常数可写为如下关系：

$$\ln K(T)=-\frac{\Delta H_0}{RT}+\frac{1}{R}\int\frac{\Delta L_{pi}\mathrm{d}T}{T^2}\mathrm{d}T+\frac{\Delta S_0}{R} \qquad (2)$$

其中

$$\Delta H_0=\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i h_{io} \qquad (3)$$

$$\Delta C_{p_i}=\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i C_{pi} \qquad (4)$$

$$\Delta S_0=\sum_{i=1}^{\sigma}\nu_i S_{oi} \qquad (5)$$

这里 h_{oi} 和 S_{oi} 是第 i 个组元 $T=0$K 时之摩尔焓与摩尔熵常数(参见吉布斯自由能)。式(2)称为能斯特方程。

勒夏特列原理 Le Chatelier principle 若一个处于平衡态系统受外界某种作用扰动后，系统的一个直接响应就是抵消或减弱外界对系统的作用，从而使系统达到一个新的平衡态。这是一个普遍多体系统的规律，称勒夏特列(Le Chatelier)原理。

化学热力学的范托夫方程中反应热数值取正或负就是该原理的一个直接例子。

溶液 solution 溶液是指液态溶体。是多种组元组成的均匀热力学系统。溶液汽化为气体就是混合气体。溶液固化后称固溶体。金属的固溶体称合金。非金属固溶体称和晶。

溶液是由 σ 个组元组成的溶体。习惯上取第一个组元为溶剂，其他组元称溶质。

稀溶液 dilute solution 设溶液中有 σ 个组元组成，若该溶液中任一个组元的化学势 μ_i 可表示成下列解析形式，

$$\mu_i=g_i+RT\ln\chi_i$$

该溶液称为稀溶液。这里 g_i 是该组元在同样温度与压强单独存在时的摩尔吉布斯自由能。χ_i 为该组元的组分。习惯上取 $i=1$ 的组元称该溶液的溶剂，$i>1$ 的各组元总称为溶质。

稀溶液也称理想溶液(ideal solution)。

溶剂 solvent 见“稀溶液”词条。

溶质 solute 见“稀溶液”词条。

杜安-马古斯关系 Duhem-Margules relation 采用化学平衡条件,并将与该稀释溶液相平衡的气体视为混合理想气体,稀溶液第 i 组元化学势可写为

$$\mu_i = g_i + RT\ln p_i \qquad (1)$$

这里 p_i 为第 i 个组元的分压强。如将式(1)代入到吉布斯-杜安关系(见相关词条),就得到杜安-马古斯关系:

$$\sum_{i=1}^{\sigma} n_i \mathrm{d}\ln p_i = 0 \qquad (2)$$

饱和溶液 Saturated solvent 在给定温度 T 和压强 p 下,溶液中所能溶解的溶质已达最大量的溶液称饱和溶液。若该溶液被缓慢降温而溶质还没有结晶出,该状况溶液处于过饱和态,称过饱和溶液。

溶解度 solubility 溶解度是指溶质在溶剂中已形成饱和溶液时,溶质相应的密度(kg/m^3)。溶解度是温度的函数。

溶解热 heat of solution 单位质量的溶质溶解于溶剂中所吸收或放出的热量,称溶解热。

二元溶液 solution of two constituents 溶液中仅溶解一个组元的溶液。称二元溶液。记溶剂组分为 χ_1,溶质为 χ_2。有

$$\chi_1 + \chi_2 = 1$$

在稀溶液时,满足喇乌耳和亨利定律(参看相关词条)。

亨利定律 Henry law 亨利(Henry)于1803年发现如下实验定律:在一定温度 T 和压强 p 下,溶质的气相分压 $p_i^{气}$ 与它在溶液中的组分成正比

$$p_i^{气} = K_i(T, p)\chi_i$$

该定律实际上是稀溶液理论的直接结果。其中 K_i 称亨利系数,是温度 T 和压强 p 的函数。

亨利系数 Henry coefficient 参见“亨利定律”词条。

喇乌耳定律 Raoult law 在1886年,喇乌耳(Raoult)发现:溶液中溶剂在其气相中的分压 p_1 之变化正比于溶质各组分之和。若记 p_1^0 为纯溶剂之饱和蒸气压,有

$$\frac{p_1^0 - p_1}{p_1^0} = x_2 + x_3 + \cdots + x_\sigma$$

该式实际上可用亨利定律求导。

能斯特分配律 Nernst distribution law 若某种稀溶液(α 相)与其气相(β 相)处于多元二相平衡,第 i 个溶质在 α 相和 β 相的组分 x_i^α 和 x_i^β 的比在温度 T 与压强 p 一定时为常数 l_i($i>1$),称能斯特分配律。即

$$\frac{\chi_i^\beta}{\chi_i^\alpha} = l_i \qquad (i>1) \qquad (1)$$

其中

$$l_i = e^{\frac{g_i^\alpha - g_i^\beta}{RT}} \qquad (2)$$

g_i^α 和 g_i^β 为第 i 个组元在 α 相和在 β 相的摩尔吉布斯自由能。

渗透压 osmotic 若有种仅能透过某种溶液中溶剂的半透膜将溶液与纯溶剂分开,溶剂在膜两边相平衡时所形成的压强差称渗透压。

记溶剂的摩尔体积为 v,据稀溶液理论可证明渗透压 Π 满足如下范霍夫定律:

$$\Pi v = \chi RT$$

其中 x 为溶质的组分。

范托夫定律 Van′t Half law 参见“渗透压”词条。

活度 activity 1901年路易斯(Lewis)在研究非理想溶液时引进两个物理量:a_i 为第 i 个组元的活度,α_i 为第 i 个组元活度系数,这样把非理想溶液第 i 个组元化学势写为

$$\mu_i = g_i + RT\ln a_i \qquad (1)$$

$$\alpha_i = a_i \chi_i \qquad (2)$$

这里 g_i 为第 i 个组元单独存在于 T,p 状况的单位摩尔吉布斯自由能,χ_i 为第 i 个组元的组分。

活度系数 activity coefficient 参见“活度”词条。

化学亲和势 chemical affinity 据热力势(见相关词条)物理概念,任何非平衡态系统经过等温等压过程趋向于平衡态时,总是引起吉布斯自由能趋向于极小。如果把这个结论用于等温等压过程的化学反应,那么该反应从反应物到生成物所引起的吉布斯自由能的减少,就

定义为该化学反应在等温等压化学反应的化学亲和势 A,即

$$A=-\Delta G$$

ΔG 为吉布斯自由能变化。

用这种方法还可定义其他过程的化学亲和势,例如等温等容过程可用自由能 F 改变定义化学亲和势。

表观物质的量 apparent mole number 设 σ 个物质的量分别为 $n_1, n_2, \cdots, n_\delta$ 和相应质量为 $m_1, m_2, \cdots, m_\delta$ 组元混合理想气体总物质的量为 n,总质量为 M,显然有

$$n=n_1+n_2+\cdots+n_\sigma \quad (1)$$

$$M=m_1+m_2+\cdots+m_\sigma \quad (2)$$

因为从混合理想气体物态方程可表示为

$$pV=(n_1+n_2+\cdots+n_\sigma)RT \quad (3)$$

考虑到式(1),该方程很像一个组元的气体。所以若引入所谓表观物质的量 μ,定义:

$$\mu=\frac{M}{n} \quad (4)$$

可以把式(3)形式上写为下式:

$$pV=\frac{M}{\mu}RT \quad (5)$$

赫斯定律 Hess law 赫斯在 1840 年发现如下定律:假如一个化学反应可以经过两组不同的中间反应过程达到,则两组不同反应过程各自中间诸过程反应热之和相等。因为反应热即谓焓差,基于焓是状态函数的概念很容易理解赫斯定律。

范托夫反应匣 Van't Half reaction case 范托夫反应匣是一个理想化的容器,其中充有混合气体,在匣的壁上装有 σ 个半透膜,混合气体中一种组元只能通过一种半透膜。

电解质 electrolyte 导电的溶液称电解质。凡分解度接近于 1 的叫强电解质,而分解度接近于零的称弱电解质。

范托夫因子 Van't Half coefficient 阿仑尼斯(Arrhenius)假设一摩尔溶质在溶剂中分解为 ν 摩尔其他组元,若分解度为 ξ,则分解后的溶质总物质的量应等于分解前的物质的量乘以如下因子

$$1+(\nu-1)\xi$$

该式称范托夫因子。

稀化热 heat of dilution 指一摩尔纯溶剂加入到大量溶液后所放出的热量。

基尔霍夫公式 Kirchhoff expression 若记 λ_1 为稀化热(参见相关词条)。λ_1 可为下式求获

$$\lambda_1=RT^2\left(\frac{\partial \ln \frac{p}{p_0}}{\partial T}\right)_{n_1}$$

式中 p 和 p_0 指溶剂处于溶液状态和纯溶剂时的蒸气压。n_1 下标表示溶剂浓度不变时求导数。

渗透系数 osmotic coefficient 渗透系数是实际观测到的渗透压值与理论上无限稀溶液在完全分解情况下的数值比。这是布耶鲁姆(Bjerrum)研究质量作用定律时引入的。

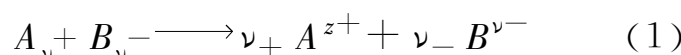
复相化学反应 heterogeneous chemical reaction 质量作用定律是描述 σ 个组元气相或稀溶液的化学反应。若 σ 个组元气相化学反应中有几个组元同时存在凝聚相(液相或固相),这时的化学反应称复相化学反应。

离子强度 ionic strength 若电解质某溶质离解成 ν_+ 个阳离子和 ν_- 个阴离子,设该溶质溶解度为 m,离子强度定义为

$$J=\frac{1}{2}(\nu_+z_+^2+\nu_-z_-^2)m$$

其中 z_+ 和 z_- 分别为阳离子和阴离子离子价。

电中性条件 condition of electrical neutrality 溶质分子完全离解为正、负离子的溶液称强电解质溶液。若溶质分子 $A_{\nu_+}B_{\nu_-}$ 在溶液中离解为 ν_+ 个 z_+ 价正离子 A^{z+} 和 ν_- 个 z_- 价负离子 B^{z-},即



$$A_{\nu}+B_{\nu}-\longrightarrow \nu_+A^{z+}+\nu_-B^{\nu-} \quad (1)$$

所谓中性条件为

$$\nu_+z_++\nu_-z_-=0 \quad (2)$$

注意 $z_+>0$, $z_-<0$。

质量摩尔浓度 molality 质量摩尔浓度是溶液浓度的一种表示法。是指 1 千克溶剂中溶质的物质的量。

热电离 thermal ionization 在某些星体大气层中金属蒸气发生如下过程,



$$A \rightleftharpoons A^++e$$

称热电离。

Statistical Physics
统计物理学

统计物理学 statistical physics 研究的对象是大数微观粒子组成的宏观物质系统，任务是按照物质的微观结构、微观粒子的运动特征及粒子间的相互作用，采用统计方法探求系统的宏观性质及其变化规律。由于粒子的数量是如此之大，无法去一一求解它们所遵从的运动方程，同时，粒子间的相互作用，外界对系统的干扰，导致粒子运动状态的不完全确定性，系统运动状态呈现随机性，但在一定条件下，系统的各运动状态均以一定的概率出现。一个宏观状态对应着瞬息万变的大量的微观运动状态，系统的某个物性的实测值是在给定条件下，各微观状态的相应量的统计平均值，统计物理学就是要找出这种统计规律性。该学科建立起微观运动与宏观运动之间的联系，阐明宏观运动形态的微观实质和基础，并日益渗透和广泛应用于凝聚态物理、核物理、化学、生物等诸多学科，获得了许多重大成就。

平衡态统计物理学研究宏观系统处于平衡态的物理现象和物理性质。1902 年美国物理学家吉布斯(Gibbs)发表著名的《统计力学的基本原理》，建立了平衡态统计物理学体系。其要点是：一条基本假定——等概率原理，一个基本观点——统计平均和一种基本方法——统计系综。统计方法分别与经典力学和量子力学相结合，形成经典统计物理学和量子统计物理学，两者在运用统计方法上是相似的，差别在于对微观状态描述的不同。量子统计物理学是在基本统计假定下对系统采用所谓混合系综的描述方法，而基本统计假定是关于密度矩阵$\hat{\rho}$的论断。微观粒子的全同性原理和它们对量子态占有法则的差异导致两种不同的量子统计法：玻色-爱因斯坦(Bose-Einstein)统计法(1924)和费米-狄拉克(Fermi-Dirac)统计法(1926)。量子统计物理学解决了许多经典统计物理不能解决的困难，20 世纪 30 年代后，量子场论方法用于统计物理使之取得了更大的进展。

非平衡态统计物理学研究宏观系统处于非平衡态的物理现象和物理性质。近平衡态自发的演化趋势是趋于平衡，故其性质与平衡态相似。涨落、弛豫和耗散(输运)是主要的近平衡过程，以昂萨格(Onsager)倒易关系、涨落耗散定理和最小熵产生原理为主要内容的线性不可逆热力学和近平衡态统计物理理论已发展成熟。远离平衡问题的研究 60 年代以来广泛开展，主要有非平衡统计物理的基本理论和方法，外场驱动下耗散系统的非线性动力学，非平衡涨落和非平衡相变等。对远离平衡的突变、有序与结构的出现，普里高金(Prigogine)等作了宏观描述，建立了耗散结构理论。之后，与混沌、孤子及分形等非线性问题的研究交织在一起，相互渗透和促进。非平衡统计物理尚未形成系统的理论，但它可能突破传统的物理学理论和方法的框架，通过与其他学科交叉结合，向较成熟的、更普遍的非平衡统计理论的方向发展，是一门具有很强生命力的、新兴的前沿学科。

平衡态统计物理学 equilibrium state statistical physics 见“统计物理学”。

经典统计物理学 classical statistical physics 见“统计物理学”。

量子统计物理学 quantum statistical physics 见“统计物理学”。

非平衡态统计物理学 nonequilibrium statistical physics 见“统计物理学”。

一、几个基本概念
Several Fundamental Conceptions

孤立系 isolated system 与外界既无能量交换也没有物质交换的系统称为孤立系，它的能量、体积和粒子数都是固定的，然而系统总是不可避免地受到外界的扰动，因此对孤立系统

应这样来理解：媒质的微扰是如此之小，以致系统的能量处于 $E \sim E+\Delta E$ 的间隔内，而 ΔE 满足条件 $\Delta E \ll E$，并且系统只能在属于同一能量 E（严格说在 E 和 $E+\Delta E$ 间隔内）的各个微观态之间跃迁。相应的统计系综是微正则系综。

闭系 closed system 与外界只交换能量而不交换物质的系统称为闭系。统计平衡的闭系通常可分为两类：一类是系统与大热源接触并达到热平衡，系统的体积、温度和粒子数保持不变，相应的统计系综是正则系综；另一类是系统分别与大热源和恒压强源接触，彼此达到热平衡和力平衡，并保持温度、压强和粒子数不变，相应的统计系综是等温等压系综。

开系 open system 与外界既交换能量也交换物质的系统称为开系。统计平衡的开系可如此考虑：系统分别与大热源和粒子源接触，彼此达到热平衡和相平衡，并保持温度、体积和化学势不变，相应的统计系综是巨正则系综。

相空间 phase space 由粒子的全部广义坐标和广义动量构成的几何空间称为相空间，又称相宇。为寻求在一定条件下，粒子按状态的统计分布规律，引入描述粒子状态的相空间。由代表粒子的 r（粒子的自由度数）个广义坐标 q_i 和 r 个广义动量 p_i 的 $2r$ 个正交轴构成的相空间称为 μ-空间。相空间中的一点代表粒子的一个运动状态，称为代表点或相点。粒子的运动状态随时间的演化对应到 μ-空间中，就是相点的径迹，通常是一条曲线，称之为相轨道。它满足哈密顿（Hamilton）正则方程

$$\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}\quad (i=1,2,\cdots,r) \tag{1}$$

式中 $H=H(p,q)$ 是粒子的哈密顿函数。对于给定的初始条件，式(1)的解具有惟一性，故不同初始条件的两条轨道永不相交，两个粒子的轨道也就不可能相交，这给出了分辨各个经典粒子的方法。实际上，由于粒子的动量和坐标的测量精度受到一定的限制，即动量和坐标的不确定值遵从海森伯（Hiesenberg）关系 $\Delta p_i \Delta q_i \geqslant h\ (i=1,2,\cdots,r)$，因此，$\mu$-空间中每个相点是大小为 h^r 的相格，h 是普朗克（Planck）常数。每个相点都对应一定的能量，对应于同一能量 ε 的相点组成一等能面，它所包围的相体积 $\sum(\varepsilon)$ 可表示为

$$\sum(\varepsilon)=\int\cdots\int_{H\leqslant\varepsilon} \mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_r\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_r \tag{2}$$

能量在 $\varepsilon \sim \varepsilon+\Delta\varepsilon$ 范围内的相体积应为 $\frac{\mathrm{d}\sum(\varepsilon)}{\mathrm{d}\varepsilon}\Delta\varepsilon$，显然，粒子的能量为 ε，单位能量间隔内的状态数即能量密度可表示为

$$\omega(\varepsilon)=\frac{1}{h^r}\frac{\mathrm{d}\sum(\varepsilon)}{\mathrm{d}\varepsilon} \tag{3}$$

它是统计物理中一个重要的量，可由式(2)求得。为描述包含 N 个粒子的宏观系统的微观运动状态及其随时间的演化，引用 f 个广义坐标 q_i 和 f 个广义动量 p_i 的 $2f$ 个正交轴构成的空间，称为 Γ-空间，或系统的相空间，这里 $f=Nr$ 是系统的自由度数。空间中的一个点即相点，表示系统的一个微观运动状态。Γ-空间中一个相点不是一个几何点，而是大小为 h^f 的相格。态密度 $\Omega(E)$ 和相体积 $\Gamma(E)$ 的表示式与式(3)和式(2)完全相似。例如，对于装在边长为 L 的容器中的 N 个单原子分子组成的理想气体，态密度为

$$\Omega(E)=\frac{1}{h^f}\frac{\mathrm{d}\Gamma(E)}{\mathrm{d}E}$$

$$=\frac{1}{h^{3N}}\left(\frac{2\mathrm{e}}{3}2\pi m\right)^{3N/2}\frac{3}{2}\left(\frac{E}{N}\right)^{\frac{3N}{2}-1}V^N \tag{4}$$

μ-空间 μ-space 见“相空间”。

相点 phase point 见“相空间”。

相轨道 phase orbit 见“相空间”。

相体积 phase volume 见“相空间”。

态密度 state density 见“相空间”。

Γ-空间 Γ-space 见“相空间”。

二、近独立粒子系经典统计理论

Classical Statistical Theory of Near Independent Particle System

近独立粒子系 near independent particle system 由同一种物质的、相互作用可以忽略的粒子组成的系统称为近独立粒子系。典型的

例子是理想气体，它是彼此间平均距离很大，相互作用力程又短的粒子的集合，粒子间除碰撞的一瞬间外，相互作用可以忽略不计。另一个典型的例子是理想固体的爱因斯坦(Einstein)模型，它将由围绕平衡位置作简谐振动的原子组成的理想固体看成是 $3N$ 个相互独立的、频率相同的简谐振子的集合。单粒子状态、能量有确切的意义，系统的能量是各个粒子能量(对于理想固体，则是简谐振子能量)的总和。

玻尔兹曼分布 Boltzmann distribution 遵从经典力学规律的近独立粒子系按单粒子态的最概然分布。考虑一能量 E、体积 V 和粒子数 N 都给定的处于统计平衡的系统。N 个编号的粒子代表点在 μ-空间的各个能量层 $\varepsilon_1, \varepsilon_2\cdots$ 中的不同相格内的某种宏观分布 $\{N_i\}=(N_1, N_2,\cdots, N_i\cdots)$ 所含微观状态数，即热力学概率为

$$W_{\{N_i\}}=\frac{N\,!}{\prod_i N_i\,!}\prod_i g_i^{N_i} \tag{1}$$

其中 $g_i(i=1,2,\cdots)$ 是相应于能量层 $\varepsilon_i(i=1,2,\cdots)$ 的相格数，N_i 是代表点落在能量层 ε_i 的 g_i 个相格内的粒子数。根据等概率原理，利用式(1)及约束条件 $\sum_i \varepsilon_i N_i=E$，$\sum_i N_i=N$，可求出含系统微观态数最多的那种宏观分布(最概然分布)即玻尔兹曼分布

$$N_i=\frac{N}{Z}g_i e^{-\varepsilon_i/k_BT},$$

$$\pi_j=\frac{N_j}{g_j}=\frac{N}{Z}e^{-\varepsilon_j/k_BT} \tag{2}$$

式(2)中第1式表明，处于单粒子能量 ε_i 的粒子数 N_i 只与 ε_i 和简并度 g_i 有关，与其他性质无关。第2式中的 π_j 是处于能量为 ε_j 的单粒子态 j 的平均粒子数，

$$Z=\sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/k_BT}=\sum_j e^{-\varepsilon_j/k_BT} \tag{3}$$

称为配分函数，其意义是出现在各个单粒子态(或单粒子能级)的相对概率之和，它是一个非常重要的量，近独立粒子系的所有热力学量均可用 Z 来表示。式(2)和(3)还可分别写为

$$dN=\frac{N}{Z}e^{-\varepsilon/k_BT}\frac{dw}{h^r}$$

$$(dw=dp_1\cdots dp_r dq_1\cdots dq_r) \tag{4}$$

$$Z=\int e^{-\varepsilon/k_BT}\frac{dw}{h^r}$$

$$(h^r\text{：一个相格的体积}) \tag{5}$$

其中 dN 为 N 个粒子中其代表点落入能量为 ε 的相体元 dw 中的数目，r 是粒子自由度数，h 是普朗克常数。

热力学概率 thermodynamical probability 见“玻尔兹曼分布”。

玻尔兹曼配分函数 Boltzmann partition function 见“玻尔兹曼分布”。

玻尔兹曼分布与热力学量 Boltzmann distribution and thermodynamic quantities 应用玻尔兹曼分布及其配分函数 Z 表示式

$$N_i=\frac{N}{Z}g_i e^{-\varepsilon_i/k_BT},$$

$$Z=\sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/k_BT} \tag{1}$$

即可求得系统的内能表示式

$$U=\sum_i \varepsilon_i N_i=Nk_BT^2\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \tag{2}$$

粒子的能量 ε_i 一般是粒子的动量、坐标以及外参量 $x_k(k=1,2,\cdots)$ 的函数，作用在能量为 ε_i 的粒子的外力为 $f_k^i=\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial x_k}(k=1,2,\cdots)$，当 x_k 改变 dx_k 时，系统对外作的元功为

$$\begin{aligned} dA &= \sum_i N_i(-f_k^i)dx_k \\ &= Nk_BT\frac{\partial \ln Z}{\partial x_k}dx_k \end{aligned} \tag{3}$$

利用式(2)、(3)及热力学公式，得到熵和自由能：

$$S=Nk_B\left[\ln Z+T\frac{\partial \ln Z}{\partial T}\right]+S_0 \tag{4}$$

$$F=-Nk_BT\ln Z-S_0T \tag{5}$$

为保证广延量 S，F 具有相加性，取和粒子数 N 有关的积分常数 S_0 为：$S_0=-k_B\ln N\,!=-Nk_B\ln\frac{N}{e}$。并有

$$S-S_0=k_B\ln W_{\{N_i\}}$$

或

$$S=k_B\ln W(W\equiv W_{\{N_i\}}) \tag{6}$$

其中 $W_{\{N_i\}}=\frac{N\,!}{\prod_i N_i\,!}\prod_i g_i^{N_i}$ 是热力学概率，已对

S_0作了适当选择。式(6)是联系平衡态熵与W的玻尔兹曼公式。

玻尔兹曼熵公式 Boltzmann entropy formula 见“玻尔兹曼分布与热力学量”。

麦克斯韦速度分布律 Maxwell distribution law of velocity 在无外场情形下,单原子分子$\left(能量\ \varepsilon=\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2m}\right)$理想气体处于平衡时,分子按速度分布的规律。它可由玻尔兹曼分布

$$\mathrm{d}w=\frac{\mathrm{d}N}{N}=\frac{h^{-r}}{Z}\mathrm{e}^{-\varepsilon/k_BT}\mathrm{d}p_1\cdots\mathrm{d}p_r\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_r \tag{1}$$

直接得到。将式(1)对分子的坐标积分,并注意到$r=3$,$p_i=mv_i(i=x,y,z)$,$Z=\frac{V}{h^3}(2\pi mk_BT)^{3/2}$,即可导出麦克斯韦速度分布律

$$\mathrm{d}w_{\boldsymbol{v}}=\frac{\mathrm{d}N_{\boldsymbol{v}}}{N}=\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{m(v_x^2+v_y^2+v_z^2)}{2k_BT}}\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z \tag{2}$$

$$\mathrm{d}w_{v,\theta,\varphi}=\frac{\mathrm{d}N_{v,\theta,\varphi}}{N}=\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}v^2\sin\theta\mathrm{d}v\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \tag{3}$$

将式(3)对θ,φ积分,又得到麦克斯韦速率分布律

$$\mathrm{d}w_v=\frac{\mathrm{d}N_v}{N}=\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}4\pi v^2\mathrm{d}v \tag{4}$$

1895年英国物理学家J.C.麦克斯韦用另外的方法最早导出这个结果。式(2)和(4)中的$\mathrm{d}w_{\boldsymbol{v}}$和$\mathrm{d}w_v$分别表示一个分子的速度分量落在$v_x\sim v_x+\mathrm{d}v_x$,$v_y\sim v_y+\mathrm{d}v_y$,$v_z\sim v_z+\mathrm{d}v_z$和速率落在$v\sim v+\mathrm{d}v$间隔内的概率。通常把

$$f(v_x,v_y,v_z)=\frac{N}{V}\frac{\mathrm{d}w_{\boldsymbol{v}}}{\mathrm{d}v_x\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z}=n\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{m}{2k_BT}(v_x^2+v_y^2+v_z^2)} \tag{5}$$

$$f(v)=\frac{N}{V}\frac{\mathrm{d}w_v}{\mathrm{d}v}=n\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}4\pi v^2 \tag{6}$$

分别称为麦克斯韦速度分布函数和麦克斯韦速率分布函数。式(6)右端中有两个因子:一个是v^2,另一个是指数函数$\mathrm{e}^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}$,两者竞争的结果导致$f(v)-v$曲线出现极大,如图所示。由式(4)可求得分子的三种特征速率:

平均速率

$$\bar{v}=\int_0^\infty v\mathrm{d}w_v=\sqrt{\frac{8k_BT}{\pi m}} \tag{7}$$

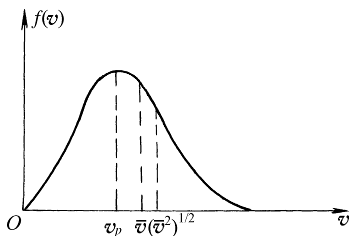
均方根速率

$$\sqrt{\overline{v^2}}=\sqrt{\int_0^\infty v^2\mathrm{d}w_v}=\sqrt{\frac{3k_BT}{m}} \tag{8}$$

最概然速率

$$v_p=\sqrt{\frac{2k_BT}{m}}\left(由\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}f(v)\Big|_{v=v_p}=0\ 得到\right) \tag{9}$$

v_p是与$f(v)$极大对应的分子的速率。三种速率的比较示于图上。



麦克斯韦速度分布函数 Maxwell distribution function of velocity 见“麦克斯韦速度分布律”。

麦克斯韦速率分布函数 Maxwell distribution function of speed 见“麦克斯韦速度分布律”。

分子的平均速率 mean speed of molecule 见“麦克斯韦速度分布律”。

分子的均方根速率 root-mean square speed

of molecule 见“麦克斯韦速度分布律”。

分子的最概然速率 most probable speed of molecule 见“麦克斯韦速度分布律”。

理想气体在重力场中的分布 ideal gas distribution in gravitational field 理想气体在重力场中,其分子数密度按高度分布的规律。对于由 N 个单原子分子组成的处于重力场中的理想气体,分子的能量为

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + mgz \qquad (1)$$

其中 z 是距地面的高度。应用玻尔兹曼分布

$$\mathrm{d}w = \frac{\mathrm{d}N'}{N} = \frac{h^{-3}}{Z}\mathrm{e}^{-\varepsilon/k_BT}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \qquad (2)$$

$$Z = \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y\,\frac{1}{h^3}\iiiint_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\varepsilon/k_BT} \times \mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\mathrm{d}z \qquad (3)$$

并将式(2)对分子的动量积分,注意到$\iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y = A$(重力场中气体柱的底面积),且引入 $n(z) = \frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z}$,则有

$$n(z) = \frac{Nmg}{Ak_BT}\mathrm{e}^{-mgz/k_BT} = n(0)\mathrm{e}^{-mgz/k_BT}$$

或 $n = n_0\mathrm{e}^{-mgz/k_BT}$ (4)

由 $p = nk_BT$ 又可得到大气压强 p 随高度变化公式

$$p = p_0\mathrm{e}^{-mgz/k_BT} \qquad (5)$$

式中 $p_0 = \frac{Nmg}{A}$是地面上的压强。式(4)和(5)表明,分子数密度及压强均随高度按指数规律衰减。势能 mgz 促使分子向 $z=0$ 处聚集,而热运动能量则导致分子向高处扩展。$n(z)$随 z 变化大小由这两个能量的比值确定。

理想气体的压强公式 pressure formula of ideal gas 气体中大量作无规则热运动的分子与器壁碰撞时传递动量,产生气体对器壁的压强。1857 年 R.克劳修斯在假设气体分子以同样的速度向各个方向作随机运动的基础上,导出压强公式

$$p = \frac{1}{3}nm\overline{v^2} \qquad (1)$$

其中 n 是分子数密度,$\overline{v^2}$为均方速度。式(1)亦可由麦克斯韦速度分布律

$$\mathrm{d}w_{v,\theta,\varphi} = \left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2} \times \mathrm{e}^{-mv^2/2k_BT}v^2\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}v = \frac{1}{4\pi}\mathrm{d}w_v\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi \qquad (2)$$

导出。一质量为 m,速度为 v 的分子与器壁碰撞分子速度在垂直于器壁方向的分量由 $v\cos\theta$ 变为 $-v\cos\theta$,因而器壁获得动量 $2mv\cos\theta$,利用式(2)即可求出 Δt 时间内撞击到面积元 ΔA 上传给器壁的动量为

$$2nm\int_0^{\infty}v^2\mathrm{d}w_v\int_0^{\pi/2}\cos^2\theta\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\frac{\Delta A\Delta t}{4\pi} = \frac{1}{3}nm\overline{v^2}\Delta A\Delta t \qquad (3)$$

于是,即可得到式(1)。

单原子分子理想气体的比热容 specific heat capacity of monatomic molecule ideal gas 单原子分子只有平动动能,其能量为

$$\varepsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \qquad (1)$$

根据能量均分原理,一个分子的平均能量 $\bar{\varepsilon}$ 和 1 摩尔气体的内能 U 分别为

$$\bar{\varepsilon} = \overline{\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)} = \frac{3}{2}k_BT \qquad (2)$$

$$U = \bar{E} = N_A\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2}N_Ak_BT = \frac{3}{2}RT \qquad (3)$$

气体的摩尔定体热容 C_V 和摩尔定压热容 C_p 则为

$$C_V = \frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}T} = \frac{3}{2}R \qquad (4)$$

$$C_p = C_V + R = \frac{5}{2}R \qquad (5)$$

实验上测量气体的比热容较困难,通常是测量比值 $\gamma = C_p/C_V \approx 1.667$。对于单原子气体,比热容的理论计算结果与实验结果符合得比较好。然而,原子中还有电子运动,而经典理论无法说明为什么电子运动对比热容无贡献。

双原子分子理想气体的比热容 specific heat

capacity of diatomic molecule ideal gas 双原子分子有两类,一类是准弹性分子,其能量 ε 由平动、转动和振动能量

$$\varepsilon_t=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2), \quad (1)$$

$$\varepsilon_r=\frac{1}{2I}\left(p_\theta^2+\frac{1}{\sin^2\theta}p_\varphi^2\right), \quad (2)$$

$$\varepsilon_v=\frac{1}{2\mu}p_r^2+\frac{\mu\omega^2}{2}r^2 \quad (3)$$

组成;另一类是刚性分子,其能量 ε 只含 ε_t 和 ε_r。应用能量均分原理,即可得到一个分子的平均能量 $\bar{\varepsilon}$,1 摩尔气体的内能 U,摩尔定体热容 C_V 及比值 $\gamma=C_p/C_V$。列表如下:

	刚性分子理想气体	准弹性分子理想气体
ε	$\varepsilon_t+\varepsilon_r$	$\varepsilon_t+\varepsilon_r+\varepsilon_v$
$\bar{\varepsilon}$	$\frac{5}{2}k_BT$	$\frac{7}{2}k_BT$
U	$\frac{5}{2}RT$	$\frac{7}{2}RT$
C_V	$\frac{5}{2}R$	$\frac{7}{2}R$
γ	$\frac{7}{5}$	$\frac{9}{7}$

实验测得的 C_V 和 γ 与温度有关,高温时,理论值与实验结果较接近,只是在极高温时,C_V 达到 $\frac{7}{2}R$,但在常温下,$C_V=\frac{5}{2}R$,这意味着振动"冻结",对热容无贡献。对于氢,这个问题更为突出,随着温度的降低,C_V 下降到单原子分子的 $\frac{3}{2}R$,这表明不仅振动而且转动也冻结,只有平动对热容有贡献。上述情况按经典统计理论观点来看是不可理解的,量子统计理论则可圆满解决。

多原子分子理想气体的比热容 specific heat capacity of polyatomic molecule ideal gas 按其结构可分为线型和非线型两种。线型分子的各原子在同一直线上,若分子包含 n 个原子,则总自由度 $3n$ 中含 3 个平动、2 个转动自由度,而其余 $3n-5$ 个是振动自由度。分子能量的平方项数则为 $3+2+2\times(3n-5)=6n-5$;非线型分子的平动和转动自由度均为 3,振动自由度是 $3n-6$,分子能量的平方项数则为 $3+3+2\times(3n-6)=6(n-1)$。根据能量均分原理,1 摩尔气体的内能 U、摩尔定体热容 C_V 和比值 $\gamma=C_p/C_V$ 分别为

$$U=\bar{E}=N_A(6n-5)\cdot\frac{1}{2}k_BT$$
$$=\left(3n-\frac{5}{2}\right)RT(\text{线型分子气体}) \quad (1)$$

$$U=\bar{E}=N_A\cdot 6(n-1)\cdot\frac{1}{2}k_BT$$
$$=3(n-1)RT(\text{非线型分子气体}) \quad (2)$$

$$C_V=\frac{dU}{dT}=(3n-\frac{5}{2})R, \quad (3)$$

$$\gamma=C_p/C_V$$
$$=\frac{3n-\frac{3}{2}}{3n-\frac{5}{2}}(\text{线型分子气体}) \quad (4)$$

$$C_V=\frac{dU}{dT}=3(n-1)R, \quad (5)$$

$$\gamma=C_p/C_V$$
$$=\frac{3n-2}{3(n-1)}(\text{非线型分子气体}) \quad (6)$$

C_V、γ 随温度 T 的变化关系比较复杂,理论值与实验结果不符。例如 CO_2(线型分子)气体,$n=3$,实验值为 $\gamma=1.18$(1050K),$\gamma=1.34$(198K),而理论值均为 1.15;对于非线型分子气体 NH_3,$n=4$,实验值为 $\gamma=1.20$(796K),$\gamma=1.32$(243K),而理论值均是 1.11。只有应用量子统计理论才能解决这个矛盾。

固体的比热容 specific heat capacity of solid 考虑 N 个分子组成的固体,$3N$ 个自由度中除整体的平动和转动共 6 个自由度外,其余 $3N-6$ 个均为振动自由度,因 N 很大,故振动自由度仍为 $3N$。尽管固体中分子相互作用很强,但可将这 $3N$ 个相互关联的微振动变换为 $3N$ 个相互独立的简正振动。于是可利用能量均分原理算出 1 摩尔固体的热运动能量 $\bar{E}$ 和摩尔定体热容 C_V

$$\bar{E}=3N_A\cdot\frac{1}{2}k_BT\cdot 2=3RT,$$

$$C_V=\frac{d\bar{E}}{dT}=3R\approx 24.94\ \mathrm{J\cdot mol^{-1}\cdot K^{-1}} \quad (1)$$

早在 1818 年,杜隆(Dulong)和珀蒂(Petit)在常温下得到固体的摩尔定压热容的实验结果

$$C_p \approx 25.10 \mathrm{J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}} \quad (2)$$

称之为杜隆-珀蒂定律。通过热力学关系 $C_p - C_V = T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p$ 并利用经验公式 $T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_p \approx 0.0214 \frac{T}{T_s} C_p$（$T_s$：固体的熔点），将式(1)中 C_V 理论值与式(2)比较，结果表明，在室温和较高温度下，理论值与杜-珀定律符合，但实验指出，固体的 C_V 随 T 降低而减小，且随 $T \to 0\,K$ 而趋于零。这种性质只有量子统计才能解释。

单原子分子理想气体的配分函数 partition function of monatomic molecule ideal gas 将分子的能量表示式 $\varepsilon = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ 代入玻尔兹曼配分函数 Z_μ 的公式，即可求得

$$Z_\mu = \int \cdots \int e^{-\varepsilon/k_B T} \frac{d\omega}{h^3}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2mk_B T}} \times \frac{dp_x dp_y dp_z}{h^3} \iiint dx dy dz$$

$$= V\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \quad (1)$$

考虑到粒子全同性原理，系统的配分函数为

$$Z = \frac{Z_\mu^N}{N!} = \frac{V^N}{N!}\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3N/2} \quad (2)$$

单原子分子理想气体的热力学量 thermodynamic quantities of monatomic molecule ideal gas 由玻尔兹曼配分函数

$$Z_\mu = \int \cdots \int e^{-\varepsilon/k_B T} \frac{dp_x dp_y dp_z dx dy dz}{h^3}$$

$$= V\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^3}\right)^{3/2} \quad (1)$$

即可求出 N 个分子组成的系统的内能 U、物态方程、自由能 F、熵 S 及定体热容 C_V：

$$U = N k_B T^2 \frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial T} = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2)$$

$$p = N k_B T \frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial V} = \frac{1}{V} N k_B T \quad (3)$$

$$F = -N k_B T \ln Z_\mu + N k_B T \ln \frac{N}{e}$$

$$= -N k_B T\left[\frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right) + \ln\frac{V}{N} + 1\right] \quad (4)$$

$$S = N k_B\left(\ln Z_\mu + \frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial T}\right) + N k_B \ln\frac{e}{N}$$

$$= N k_B\left[\frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right) + \ln\frac{V}{N} + 1\right] + \frac{3}{2} N k_B \quad (5)$$

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2} N k_B \quad (6)$$

双原子分子理想气体的配分函数 partition function of diatomic molecule ideal gas 分子（准弹性）的能量由平动、转动和振动能量三部分组成，可表示为

$$\varepsilon = \varepsilon_t + \varepsilon_r + \varepsilon_v$$

$$= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2I}\left(p_\theta^2 + \frac{1}{\sin^2\theta} p_\varphi^2\right) + \frac{1}{2\mu} p_r^2 + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2 \quad (1)$$

式中 $m = m_1 + m_2$ 是两原子质量和，I 是分子绕质心的转动惯量，$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ 为折合质量，ω 为原子振动的圆频率。玻尔兹曼配分函数为

$$Z_\mu = \int \cdots \int e^{-\frac{1}{2k_B T}(\varepsilon_t + \varepsilon_r + \varepsilon_v)} \frac{d\omega_t}{h^3} \frac{d\omega_r}{h^2} \frac{d\omega_v}{h}$$

$$= Z_\mu^t \cdot Z_\mu^r \cdot Z_\mu^v \quad (2)$$

其中 $d\omega_t = dp_x dp_y dp_z dx dy dz$，$d\omega_r = dp_\theta dp_\varphi d\theta d\varphi$，$d\omega_v = dp_r dr$，$Z_\mu^t$、$Z_\mu^r$ 和 Z_μ^v 分别是平动、转动和振动配分函数。容易算出

$$Z_\mu^t = V\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2}, \quad Z_\mu^r = \frac{8\pi^2 I k_B T}{h^2},$$

$$Z_\mu^v = \frac{2\pi k_B T}{\omega h} \quad (3)$$

包含 N 个分子的系统的配分函数可写成

$$Z = \frac{1}{N!}(Z_\mu^t \cdot Z_\mu^r \cdot Z_\mu^v)^N$$

$$= \frac{V^N}{N!}\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3N/2}\left(\frac{8\pi^2 I k_B T}{h^2}\right)^N \times \left(\frac{2\pi k_B T}{\omega h}\right)^N \quad (4)$$

若分子是刚性的，$\varepsilon = \varepsilon_t + \varepsilon_r$，则系统的配分函

数为

$$Z=\frac{1}{N!}(Z_\mu^t \cdot Z_\mu^r)^N$$
$$=\frac{V^N}{N!}\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{3N/2}\left(\frac{8\pi^2 Ik_BT}{h^2}\right)^N \quad (5)$$

双原子分子理想气体的热力学量 thermodynamical quantities of diatomic molecule ideal gas

玻尔兹曼配分函数为

$$Z_\mu=\int\cdots\int e^{-\frac{1}{k_BT}(\varepsilon_t+\varepsilon_r+\varepsilon_v)}\frac{d\omega_t}{h^3}\frac{d\omega_r}{h^2}\frac{d\omega_v}{h}$$
$$=Z_\mu^t\cdot Z_\mu^r\cdot Z_\mu^v \quad (1)$$

其中 Z_μ^t、Z_μ^r 和 Z_μ^v 分别是平动、转动和振动配分函数，并有

$$Z_\mu^t=V\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{3/2},\ Z_\mu^r=\frac{8\pi^2 Ik_BT}{h^2},$$
$$Z_\mu^v=\frac{2\pi k_BT}{\omega h} \quad (2)$$

由式(1)和(2)即可算出 N 个分子组成的系统的内能 U、物态方程、自由能 F、熵 S 和定体热容 C_V

$$U=Nk_BT^2\frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial T}$$
$$=Nk_BT^2\left(\frac{\partial \ln Z_\mu^t}{\partial T}+\frac{\partial \ln Z_\mu^r}{\partial T}+\frac{\partial \ln Z_\mu^v}{\partial T}\right)$$
$$=\frac{3}{2}Nk_BT+Nk_BT+Nk_BT$$
$$=\frac{7}{2}Nk_BT$$

$$p=Nk_BT\frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial V}=Nk_BT/V$$

$$F=-Nk_BT\ln Z_\mu+Nk_BT\ln\frac{N}{e}$$
$$=-Nk_BT\left[\frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)+\ln\frac{V}{N}+1\right]$$
$$-Nk_BT\left[\ln\left(\frac{8\pi^2 Ik_BT}{h^2}\right)+\ln\left(\frac{2\pi k_BT}{\omega h}\right)\right]$$

$$S=Nk_B\left(\ln Z_\mu+T\frac{\partial \ln Z_\mu}{\partial T}\right)+Nk_B\ln\frac{e}{N}$$
$$=Nk_B\left[\frac{3}{2}\ln\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)+\ln\frac{V}{N}+1\right]+$$
$$Nk_B\left[\ln\left(\frac{8\pi^2 Ik_BT}{h^2}\right)+\ln\left(\frac{2\pi k_BT}{\omega h}\right)-\frac{7}{2}\right]$$

$$C_V=\frac{dU}{dT}=\frac{7}{2}Nk_B$$

电介质中电偶极子的统计性质 statistical property of electric dipoles in dielectric N 个电偶极子可看做双原子分子的理想气体。应用玻尔兹曼分布讨论偶极子系统的统计性质，求出电极化强度。通常，电偶极矩可表示为

$$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_0+\boldsymbol{p}_i=\boldsymbol{p}_0+\alpha\boldsymbol{E}\quad(\boldsymbol{E}:\text{外电场强度})\quad(1)$$

其中 $\boldsymbol{p}_0$ 是分子的固有偶极矩，$\boldsymbol{p}_i$ 是感应偶极矩，α 是分子的感应极化率，$\boldsymbol{p}$ 沿 $\boldsymbol{E}$ 方向的分量为

$$p=p_0\cos\theta+\alpha E\quad(\theta:\boldsymbol{p}_0\text{ 与 }\boldsymbol{E}\text{ 的夹角})\quad(2)$$

$\boldsymbol{p}_0$ 和 $\boldsymbol{p}_i$ 在 $\boldsymbol{E}$ 中的能量分别是 $-\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{E}$ 和 $\int(-\boldsymbol{p}_i)\cdot d\boldsymbol{E}=-\frac{\alpha}{2}E^2$，以 I 表示等效转子的转动惯量。故电偶极子在 $\boldsymbol{E}$ 中的能量为

$$\varepsilon=\varepsilon_0+\varepsilon_r-\frac{\alpha}{2}E^2$$
$$=\varepsilon_0+\frac{1}{2I}\left(p_\theta^2+\frac{p_\varphi^2}{\sin^2\theta}\right)$$
$$-p_0E\cos\theta-\frac{\alpha}{2}E^2\quad(3)$$

其中 ε_0 是与转动和电场均无关的能量。电偶极子的转动配分函数可以算出(令 $x=p_0E/k_BT$)：

$$Z_\mu^r=\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^\pi d\theta\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_\theta dp_\varphi}{h^2}e^{-\varepsilon_r/k_BT}$$
$$=\frac{4\pi^2 Ik_BT}{h^2}\int_0^\pi e^{p_0E\cos\theta/k_BT}\sin\theta d\theta$$
$$=\frac{8\pi^2 Ik_BT}{h^2}\frac{\sin hx}{x}\quad(4)$$

电偶极矩的平均值 $\langle p\rangle$ 和电极化强度 P 分别为

$$\langle p\rangle=\langle p_0\cos\theta\rangle$$
$$=\frac{\int p_0\cos\theta e^{-\varepsilon_r/k_BT}d\omega_r}{\int e^{-\varepsilon_r/k_BT}d\omega_r}+\alpha E$$
$$=k_BT\frac{\partial}{\partial E}\ln Z_\mu^r+\alpha E$$
$$=p_0\left(\coth x-\frac{1}{x}\right)+\alpha E\quad(5)$$

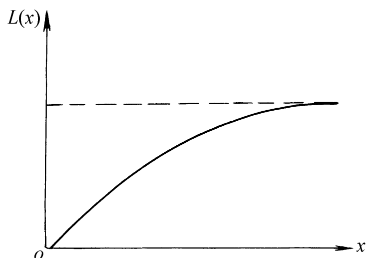
$$P=\frac{N}{V}\langle p\rangle$$
$$=n\left\{\alpha E+p_0\left(\coth x-\frac{1}{x}\right)\right\}$$

$$= n\{\alpha E + p_0 L(x)\} \quad (6)$$

式(6)称为电介质的朗之万(Langevin)公式,式中

$$L(x) = L\left(\frac{p_0 E}{k_B T}\right) = \coth x - \frac{1}{x} \quad (7)$$

称为朗之万函数,曲线如图所示。对于低温强电场情形,$p_0 E \gg k_B T$ 或 $x \gg 1$,则有 $P = n(\alpha E + p_0)$,电介质极化呈饱和状态;对于高温弱电场情形,$p_0 E \ll k_B T$ 或 $x \ll 1$,则 $L(x) = \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \frac{2x^5}{315} - \cdots$, $P = n\left(\frac{p_0^2 E}{3k_B T} + \alpha E\right)$,只有感应偶极矩状态。其中 $n = \frac{N}{V}$ 是分子数密度。



电偶极子的转动配分函数 rotational partition function of electric dipole 见“电介质中电偶极子的统计性质”。

平均电偶极矩 average electric dipole moment 见“电介质中电偶极子的统计性质”。

朗之万公式 Langevin formula 见“电介质中电偶极子的统计性质”。

朗之万函数 Langevin function 见“电介质中电偶极子的统计性质”。

三、系综理论
Ensemble Theory

系统的微观态 microscopic state of system 经典的近独立粒子系统在某一时刻,N 个可分辨粒子的坐标和动量都确定了,系统的运动状态就确定了,这样确定的状态称为系统的微观态。N 个编号的粒子 $a, b, c, \cdots$ 在 μ-空间的代表点按能值为 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \cdots$ 的能量层 1,2,3,…内各个不同相格的一种分布就是系统的一个微观态。它也可用 Γ-空间的一个相点来表示。量子理想气体的微观态是由一套量子数确定的系统的量子态,它定义为 N 个全同粒子按单粒子能级 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_i, \cdots$ 中各个不同的单粒子态分布的一组粒子占据数$\{n_{i\alpha}\}$($i = 1,2,\cdots;\alpha = 1,2,\cdots,g_i$),$n_{i\alpha}$是第 i 个能级中第 α 个量子态上的粒子数,g_i 为能级 ε_i 的量子态数即简并度,而占据 ε_i 的粒子数则为 $N_i = \sum_{\alpha=1}^{g_i} n_{i\alpha}$。

系统的宏观态 macroscopic state of system 由一些描述系统的宏观参量如温度 T,压强 p,体积 V 等所确定的状态称为系统的宏观态。对于经典的近独立粒子系统,用一组按 μ-空间中能量层 ε_i($i = 1,2,\cdots$)分布的粒子代表点数$\{N_i\} \equiv (N_1, N_2, \cdots N_i, \cdots)$来确定系统的宏观态,$N_i$ 是出现在第 i 个能量层的 g_i 个相格中的代表点数目。量子理想气体的宏观态由 N 个全同粒子按单粒子能级 ε_i($i = 1,2,\cdots$)分布的一组粒子数$\{N_i\} \equiv (N_1, N_2, \cdots, N_i, \cdots)$来确定,$N_i$ 是占据能级 ε_i 中 g_i 个单粒子态的粒子数。每一个微观态都对应一个宏观态,而一个宏观态则对应若干个微观态。

统计系综 statistical ensemble 是为了清楚地了解和有效地运用统计规律性而引入的一个重要的概念和方法,它定义为:大数处在相同的宏观条件下,彼此独立而全同的系统的集合。“全同”是指这些系统系由同种物质构成,并具有相同的自由度数和相同的哈密顿量。可用统计系综来描述大数粒子系统在宏观长时间上的平均行为,求系统某物理量 B 的平均值(等于观测值 B_{obs})等同于对系综求该物理量 B 的平均值,这可表示为

$$B_{obs} = \langle B \rangle = \iint B(p,q)\rho(p,q,t)\,d\Gamma \quad (1)$$

其中 $B(p,q) \equiv B(p_1,\cdots,p_f;q_1\cdots,q_f)$是 B 在系统微观态(p,q)的值,$\rho(p,q,t)$称为系综分布函数,即 Γ-空间的概率密度,$d\Gamma = dp\,dq$ 是相体元。式(1)的另一形式为

$$\langle B \rangle = \sum_j W_j B_j \quad (2)$$

式中 B_j 是 B 在系统的量子态 j 的值,系综分布 W_j 为系统处在量子态 j 的概率。当组成系综的系统处于统计平衡时,宏观量 $\langle B\rangle$ 与时间 t 无关,故式(1)中的 ρ 不显含时间,于是有

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \tag{3}$$

式(3)是系统处于平衡态的必要条件,称为统计平衡条件,满足此条件的系综称为稳定系综。按平衡系统所处的不同的宏观条件,需采用不同的统计系综。

统计平均值 statistical average value 见“统计系综”。

稳定系综 stationary ensemble 见“统计系综”。

统计平衡条件 statistical equilibrium condition 见“统计系综”。

刘维尔定理 Liouville theorem 可表述为:保守力学系统的系综在相空间的代表点密度在运动中保持不变。或者说,系综随时间的演化,可以看做相空间中代表点组成的不可压缩流体的运动,其分布函数或概率密度 ρ 遵从下述刘维尔方程

$$\frac{d\rho}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{f}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)=0 \tag{1}$$

式中 H 和 f 分别是系统的哈密顿函数和自由度。式(1)是刘维尔定理的数学形式,实际上也是系综的运动方程。对于非平衡系统,刘维尔定理同样成立,刘维尔方程依然适用。式(1)可由连续性方程和哈密顿正则方程导出。

刘维尔方程 Liouville equation 见“刘维尔定理”。

相体积不变定理 phase volume invarient theorem 可表述为:相体积元在正则变换下保持不变。对相体积不变定理简要论证如下。以 τ 和 τ' 分别代表正则变换前后的相体积,则有

$$\int_{\tau'}d\Gamma'=\int_{\tau}|J|\,d\Gamma \tag{1}$$

可以证明式(1)中的雅可比行列式(Jacobian) $|J|$ 为

$$|J|=\left|\frac{\partial(p_1',\cdots,p_f';q_1',\cdots,q_f')}{\partial(p_1,\cdots,p_f;q_1,\cdots,q_f)}\right|=1 \tag{2}$$

因此得到 $\int_{\tau'}d\Gamma'=\int_{\tau}d\Gamma$。由相点密度在运动中保持不变可以推断相体积元在运动中保持不变,另一方面,遵从正则方程的相体积元在相空间中的运动等效于由无穷多个正则变换组成,故由刘维尔定理可变换成相体积不变定理。可见该定理与刘维尔定理是等价的。

等概率原理 principle of equal probabilities 当系统处于平衡时,如果除能量一定、体积一定和粒子数一定外,没有任何其他的限制,则发现系统处在各微观状态的概率都是相同的。称之为等概率原理。它是统计物理学的一个重要的基本假定,大量由这个基本假定得出的推论都被实验证实。

微正则系综 microcanonical ensemble 由大数 M 个孤立系统组成的系综。等概率原理给出系统处于平衡时的分布规律:“在相空间能量层 $E\sim E+\Delta E$ 中系综分布函数或概率密度 $\rho(p,q)$ 为一常数,在这能量层外则为零。”以 $\Omega_1(E)\Delta E$ 表示 $E\sim E+\Delta E$ 内系统的微观态数,则有

$$\rho(p,q)=\begin{cases}[\Omega_1(E)\Delta E]^{-1} \\ (E\leqslant H(p,q)\leqslant E+\Delta E) \\ 0 \\ (H(p,q)<0 \text{ 和 } \\ H(p,q)>E+\Delta E)\end{cases} \tag{1}$$

考虑粒子全同性原理和海森伯测不准关系,可将 $\Omega_1(E)\Delta E$ 表示为

$$\Omega_1(E)\Delta E=\frac{1}{N!h^f}\iint\limits_{E\leqslant H(p,q)\leqslant E+\Delta E}dp\,dq \tag{2}$$

对于量子力学系统,式(1)取如下形式

$$w_j=\frac{M_j}{M}=\Omega^{-1}(E,V,N)\ (j=1,2,\cdots) \tag{3}$$

其中 M_j 为处于量子态 j 的系统数,Ω 代表系统可能的量子态数,w_j 为系统处于量子态 j 的概率,它是归一化的。式(1)、(3)称为微正则分布。系统的能量 E、体积 V 和粒子数 N 是确定的,它们是系综的独立宏观状态参量。微正则系综在理论上非常重要。

微正则分布 microcanonical distribution 见

"微正则系综"。

各态历经假说 ergodic hypothesis 玻尔兹曼于 1871 年提出。"ergodic"一词来源于希腊语，原意是由功和路径两部分组成。这个假说是：保守力学系统从任意初态开始运动，只要时间足够长，它将经过相空间能量曲面上的一切微观运动状态。由此可以证明，力学系统微观状态的函数 B 在足够长时间上的平均等于它在微正则系综上所取的平均，即在相应的能量曲面上所取的平均。然而，这个假说并没有得到一般性的证明，根据力学理论，这个假说本身并不成立。有人认为各态历经假说是统计物理学的基础，这是没有根据的。建立在等概率原理基础上的微正则系综才是统计物理的基本假设，它不能从力学规律推导出来。

孤立系统的熵 entropy of isolated system 由玻尔兹曼定义为

$$S=-k_B\sum_j w_j\ln w_j,\ \sum_j w_j=1 \tag{1}$$

其中 w_j 是系统出现在微观态 j 的概率。若系统的状态是连续变化的，则玻尔兹曼熵表示式为

$$S=-k_B\int\rho\ln\rho\mathrm{d}\Gamma,\ \int\rho\mathrm{d}\Gamma=1 \tag{2}$$

式中 ρ 是系综分布函数。当系统处于统计平衡时，利用微正则分布，即可得到

$$S(E,N,V)=k_B\ln\Omega(E,N,V) \tag{3}$$

其中 Ω 为系统总的微观状态数。熵 S 可看做微正则系综的特征函数。设 $\rho(p,q)$为微正则系综分布函数，

$\rho'(p,q)$为同一相空间的同一能量曲面上定义的任意分布函数，容易证明以下不等式

$$-\int\rho'\ln\rho'\mathrm{d}\Gamma\leqslant-\int\rho\ln\rho\mathrm{d}\Gamma \tag{4}$$

此式表明，孤立系统遵从微正则分布时，其熵为最大。

正则系综 canonical ensemble 由大数 M 个相同的、与大热源交换能量并达到平衡，而粒子数 N 和体积 V 固定的系统组成的系综。系统的温度 T 和 N、V 是确定的，但能量 E 出现涨落。系综的独立宏观状态参量是 T、V 和 N。

正则分布 canonical distribution 又称吉布斯正则分布，是正则系综按微观态的一种最概然分布。如图所示：

$$\boxed{\begin{matrix}N\\V\end{matrix}}-\boxed{\begin{matrix}N\\V\end{matrix}}-\boxed{\begin{matrix}N\\V\end{matrix}}-\cdots\cdots-\boxed{\begin{matrix}N\\V\end{matrix}}$$
$$1\qquad\quad 2\qquad\quad 3\qquad\qquad\qquad\quad M$$

将大数 M 个相同的系统(闭系)排列在不同的位置上，因而是可分辨的，其中任意一个作为研究的系统，其余 $M-1$ 个当做大热源，相互接触并达到热平衡，忽略相互作用能量。应用等概率原理可求出含系综微观态数最多的一种宏观分布$\{M_j\}\equiv(M_1,M_2,\cdots,M_j,\cdots)$，从而得到系统分别处于微观态(量子态)$j$ 和能级 E_i 的概率，即正则分布

$$w_j=\frac{M_j}{M}=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-E_j/k_BT},$$

$$w_i=\frac{1}{Z}\Omega(E_i)\mathrm{e}^{-E_i/k_BT} \tag{1}$$

其中 M_j 是处于微观态 j 的系统数，$\Omega(E_i)$是系统的能级为 E_i 的微观状态数，即简并度。

$$\begin{aligned}Z(T,V,N)&=\sum_j\mathrm{e}^{-E_j/k_BT}\\&=\sum_i\Omega(E_i)\mathrm{e}^{-E_i/k_BT}\end{aligned} \tag{2}$$

称为正则配分函数或正则态和函数，它表示系统出现在各个微观态或能级的相对概率之和。Z 是平衡态统计物理中一个常用的、非常重要的量，所有热力学量均可用它来表示。正则分布在相空间可表示为

$$\rho(p,q)=\frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-E(p,q)/k_BT},$$

$$\rho_E=\frac{1}{Z}\Omega(E)\mathrm{e}^{-E/k_BT} \tag{3}$$

ρ、ρ_E 称为正则系综分布函数或概率密度，$\Omega(E)$是态密度，配分函数 Z 可写成

$$\begin{aligned}Z&=\frac{1}{N!h^{Nr}}\iint\mathrm{e}^{-E(q,p)/k_BT}\mathrm{d}p\mathrm{d}q\\&=\int\mathrm{e}^{-E/k_BT}\Omega(E)\mathrm{d}E\end{aligned} \tag{4}$$

式中因子 $N!h^{Nr}$是根据粒子全同性原理和海森伯测不准关系而引入的。在式(3)的第二式中，影响概率密度 ρ_E 的因素有两个，一个是 e^{-E/k_BT}，它随能量的增大而指数下降；另一个是 $\Omega(E)$，随能量的增大而迅速上升。可见它

们使系统有一最概然能量 E_p,在 E_p 处,$\rho(E)$ 有尖锐的极大值。

正则配分函数 canonical partition function 见“正则分布”。

正则系综的热力学函数 thermodynamic function of canonical ensemble 正则配分函数 $Z(T, V, N)$ 的对数 $\ln Z$ 是一个广延量,可以预料,$\ln Z$ 必定和属于广延量的热力学函数有着密切的联系。于是,定义一个函数

$$F = -k_B T \ln Z = -\beta^{-1} \ln Z$$

$$\left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right) \qquad (1)$$

可以证明,它与热力学中的自由能(或亥姆霍兹(Helmholy)自由能)是相同的,$F(T, V, N)$ 可视为正则系综的特征函数,其统计表示式(1)是正则系综的基本公式之一。由式(1)可得到内能 U、熵 S 和压强 p 的表示式

$$\left[\frac{\partial}{\partial\beta}(\beta F)\right]_{V,N} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z$$

$$= \frac{1}{Z}\sum_j E_j e^{-\beta E_j}$$

$$\text{或} \quad U = \langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = k_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \qquad (2)$$

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V,N} = k_B \ln Z + k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$$

$$\text{或} \quad S = -k_B \sum_j w_j \ln w_j = -k_B \langle \ln w_j\rangle \qquad (3)$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial V} \qquad (4)$$

式(3)中 w_j 是正则分布。若系统的外参量除 V 外,还有 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$,则与 x_i 对应的广义力 X_i 的统计平均值为

$$\langle X_i\rangle = -\left\langle\frac{\partial E}{\partial x_i}\right\rangle = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial x_i}$$

$$\text{或} \quad \langle X_i\rangle = -\frac{\partial F}{\partial x_i} = k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial x_i}$$

$$(i=1,2,\cdots,n) \qquad (5)$$

正则系综的自由能公式 free energy formula of canonical ensemble 见“正则系综的热力学函数”。

正则系综的能量涨落公式 energy fluctuation formula of canonical ensemble 应用正则分布可求得系统的能量涨落公式

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

$$= k_B T^2 \left(\frac{\partial \langle E\rangle}{\partial T}\right)_V = k_B T^2 C_V$$

(均方涨落) (1)

$$\sqrt{\frac{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}{\langle E\rangle^2}} = \sqrt{\frac{k_B T^2 C_V}{\langle E\rangle^2}}$$

(相对涨落) (2)

式中 C_V 是定体热容,$\beta = \frac{1}{k_B T}$,Z 是正则配分函数。对于由 N 个自由度为 r 的经典粒子组成的理想气体,$\langle E\rangle \propto Nr\frac{k_B T}{2}$,$C_V \propto Nr\frac{k_B}{2}$,于是式(2)变为

$$\sqrt{\frac{\langle(\Delta E)^2\rangle}{\langle E\rangle^2}} \propto \sqrt{\frac{2}{Nr}} \qquad (3)$$

可见,能量的相对涨落与粒子数的平方根成反比,由于 N 很大,故极小,不产生宏观效应。

正则系综的广义力涨落公式 generalized force fluctuation formula of canonical ensemble 系统对外界作用的广义力微观表达式为

$$X_i = -\frac{\partial E}{\partial x_i}(i=1,2,\cdots) \qquad (1)$$

其中 x_i 是系统的广义坐标。X_i 的统计平均值为

$$\langle X_i\rangle = -\left\langle\frac{\partial E}{\partial x_i}\right\rangle = k_B T \frac{\partial}{\partial x_i}\ln Z$$

$$= -\frac{\partial F}{\partial x_i} \quad (i=1,2,\cdots) \qquad (2)$$

是一宏观量,式中 Z 和 F 分别是配分函数和自由能。将下式

$$e^{-F/k_B T} = \iint e^{-E/k_B T}\frac{\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q}{h^{Nr}N!} \qquad (3)$$

两端对 x_i 求导两次,即可得到广义力涨落公式

$$\langle (X_i - \langle X_i \rangle)^2 \rangle = \langle X_i^2 \rangle - \langle X_i \rangle^2$$

$$= k_B T \left[\left\langle \frac{\partial X_i}{\partial x_i} \right\rangle - \frac{\partial \langle X_i \rangle}{\partial x_i} \right]$$

$$(i = 1, 2, \cdots) \qquad (4)$$

经典正则配分函数的量子修正 quantum corrections to the classical canonical partition function 当正则配分函数

$$Z = \sum_i \Omega(E_i) e^{-E_i / k_B T} \qquad (1)$$

过渡到经典情形时,需作量子力学修正:(1)根据海森伯测不准关系,系统的每个微观态占据 Γ-空间中体积为 h^f 的相格,故宏观无限小间隔($p, p + \mathrm{d}p$)、($q, q + \mathrm{d}q$)内的状态数是 $\frac{\mathrm{d}p\mathrm{d}q}{h^f} = \frac{\mathrm{d}p\mathrm{d}q}{h^{Nr}}$($N$:粒子数,$r$:粒子自由度数);(2)按粒子全同性原理,不可分辨的粒子间作 N! 次交换其结果都属于系统的同一微观态,而对相空间积分时把 N 个粒子间两两交换产生的 N! 个不同的微观态都算进去了,它是量子力学计算结果的 N! 倍。因此,Z 的经典表示式应为

$$Z = \frac{1}{N! h^{Nr}} \iint e^{-E(p, q) / k_B T} \mathrm{d}p \mathrm{d}q \qquad (2)$$

巨正则系综 grand canonical ensemble 又称 T-μ 系综(T:温度,μ:化学势),是由大数 M 个相同的、与大热源和粒子源交换能量和粒子并达到平衡、而体积 V 固定的系统组成的系综。系统的 T、μ 和 V 是确定的,但能量 E 和粒子数 N 出现涨落。系综的独立宏观状态参量是 T、V 和 μ。

巨正则分布 grand canonical distribution 又称 T-μ 分布,是巨正则系综按微观态的一种最概然分布。如图所示将大数 M 个相同的系统(开系)排列在不同的位置上,因而是可分辨的,其中任意一个作为研究的系统,其余 $M-1$

V —	V —	V —·····—	V
1	2	3	M

个当做大热源和粒子源,相互接触并达到热平衡和相平衡,忽略相互作用能量。应用等概率原理,可以求出含系综微观状态数最多的一种宏观分布 $\{M_{j(N)}\} \equiv (M_{1(N)}, M_{2(N)}, \cdots, M_{j(N)}, \cdots)$,从而得到系统分别处于粒子数为 N 的微观态(量子态)$j(N)$ 和能级 $E_{i(N)}$ 的概率,即巨正则分布

$$w_{j(N)} = \frac{M_{j(N)}}{M} = \frac{1}{\mathscr{Z}} e^{-E_{j(N)} / k_B T} e^{(\mu N / k_B T)},$$

$$w_{i(N)} = \frac{1}{\mathscr{Z}} \Omega(E_{i(N)}, N) \cdot e^{-E_{i(N)} / k_B T} e^{(\mu N / k_B T)} \qquad (1)$$

式中 $M_{j(N)}$ 是处于微观态 $j(N)$ 的系统数,μ 是化学势,$\Omega(E_{i(N)}, N)$ 表示系统的粒子数为 N、能级为 $E_{i(N)}$ 的微观态数,即简并度。

$$\mathscr{Z}(T, V, \mu) = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{j(N)} e^{-(E_{j(N)} - \mu N) / k_B T} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{i(N)} \Omega(E_{i(N)}, N) \cdot e^{-(E_{i(N)} - \mu N) / k_B T} \qquad (2)$$

称为巨配分函数或巨态和函数,其意义是先将系统出现在 N 固定下的各个微观态 $j(N)$ 或能级 $E_{i(N)}$ 的相对概率相加,再对 N 求和。$\mathscr{Z}$ 是一个常用的、非常重要的量,所有热力学函数均可用它来表示。巨正则分布在相空间可表示为

$$\rho(p, q) = \mathscr{Z}^{-1} e^{-\frac{1}{k_B T}(E^{(N)}(p, q) - \mu N)},$$

$$\rho_E^{(N)} = \mathscr{Z}^{-1} e^{-\frac{1}{k_B T}(E^{(N)} - \mu N)} \Omega(E, N) \qquad (3)$$

ρ、$\rho_E^{(N)}$ 称为巨正则系综分布函数或概率密度,$\Omega(E, N)$ 是态密度。巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 可写成

$$\mathscr{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \left[\frac{1}{N! h^{Nr}} e^{\mu N / k_B T} \cdot \iint e^{-E^{(N)}(p, q) / k_B T} \mathrm{d}p \mathrm{d}q \right]$$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} e^{\mu N / k_B T} \int e^{-E^{(N)} / k_B T} \Omega(E, N) \mathrm{d}E \qquad (4)$$

注意在应用式(3)和(4)计算时,要取式中的 $\frac{1}{k_\mathrm{B} T}$ 和 $\frac{\mu}{k_\mathrm{B} T}$ 为独立变量。

巨配分函数 grand partition function 见“巨正则分布”。

巨正则系综的热力学函数 thermodynamic function of grand canonical ensemble 巨配分函数 $\mathscr{Z}(T, V, \mu)$的对数 $\ln\mathscr{Z}$是一广延量，可以预料，$\ln\mathscr{Z}$一定与属于广延量的热力学函数有着密切的联系。为此，选取温度 T、体积 V 和化学势 μ 为独立变量，对自由能 F 作勒让德变换(Legendre transformation)

$$J = F - G = F - \mu\langle N\rangle = -p(T,\mu)V$$

$$\mathrm{d}J = -S\mathrm{d}T - p\mathrm{d}V - \langle N\rangle\mathrm{d}\mu \tag{1}$$

式中 G 为吉布斯函数，压强 p 是强度量，与 V 无关，$\langle N\rangle$是粒子数平均值。于是有

$$\left[\frac{\partial}{\partial\mu}(k_BT\ln\mathscr{Z})\right]_{T,V} = \mathscr{Z}^{-1}\sum_N\sum_{j(N)}\left[N\mathrm{e}^{-\frac{1}{k_BT}(E_{j(N)}-\mu N)}\right] = \langle N\rangle = -\left(\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)_{T,V} \tag{2}$$

$$J \equiv -Vp(T,\mu) = -k_BT\ln\mathscr{Z} \tag{3}$$

$J(T, V, \mu)$可视为巨正则系综的特征函数，称为广势函数或巨热力势，其统计表示式(3)是巨正则系综的基本公式之一。由式(3)容易得到压强 p、熵 S 和内能 U 的表示式

$$p = -\frac{J}{V} = \frac{k_BT}{V}\ln\mathscr{Z} \tag{4}$$

$$S = -\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{V,\mu} = k_B\ln\mathscr{Z} + k_BT\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial T} \tag{5}$$

$$U = J + TS + \mu\langle N\rangle = k_BT^2\left(\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial T}\right)_{\frac{\mu}{k_BT}}$$

或

$$U = \langle E\rangle = \sum_{N=0}^{\infty}\sum_{j(N)}E_{j(N)}w_{j(N)} = k_BT^2\left(\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial T}\right)_{\frac{\mu}{k_BT}} \tag{6}$$

$w_{j(N)}$为巨正则分布。若系统的外参量除 V 外，还有 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$，则与 x_i 对应的广义力 X_i 的统计平均值为

$$\langle X_i\rangle = -\left\langle\frac{\partial E}{\partial x_i}\right\rangle = k_BT\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial x_i}$$

或

$$\langle X_i\rangle = -\frac{\partial J}{\partial x_i} = k_BT\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial x_i}$$

$$(i=1,2,\cdots,n) \tag{7}$$

巨正则系综的巨热力势公式 grand thermodynamic potential formula of grand canonical ensemble 见“巨正则系综的热力学函数”

巨正则系综的能量涨落公式 energy fluctuation formula of grand canonical ensemble 按统计平均值的定义，应用巨正则分布，即可求得巨正则系综的能量均方涨落公式

$$\langle(\Delta E)^2\rangle_{巨} = \langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = \left(\frac{\partial^2\ln\mathscr{Z}}{\partial\beta^2}\right)_{\beta\mu,V} = k_BT^2\left(\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}\right)_{\frac{\mu}{k_BT},V} \tag{1}$$

式中 $\beta=\dfrac{1}{k_BT}$，μ 是化学势，$\mathscr{Z}$为巨配分函数。式(1)又可化为

$$\langle(\Delta E^2)\rangle_{巨} = \langle(\Delta E)^2\rangle_{正} + \langle(\Delta N)^2\rangle\left(\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\langle N\rangle}\right)^2_{T,V} \tag{2}$$

上式右端第一项表示系统与外界只交换能量引起的涨落，即正则系综的能量涨落；第二项则是系统与外界交换粒子引起的能量涨落。$\langle(\Delta N)^2\rangle$是系统的粒子数均方涨落。

巨正则系综的粒子数涨落公式 particle number fluctuation formula of grand canonical ensemble 按统计平均值的定义，应用巨正则分布，即可求得粒子数 N 的一次矩和二次矩

$$\langle N\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial\mu} = -\left(\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)_{T,V},$$

$$\langle N^2\rangle = \frac{1}{\beta^2}\frac{1}{\mathscr{Z}}\frac{\partial^2\mathscr{Z}}{\partial\mu^2} \tag{1}$$

其中 $\beta=\dfrac{1}{k_BT}$，$\mathscr{Z}$是巨配分函数，J为巨热力势，由此得到粒子数的均方涨落公式

$$\langle(\Delta N)^2\rangle = \langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2 = \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\ln\mathscr{Z}}{\partial\mu^2} = -\frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial^2 J}{\partial\mu^2}\right)_{T,V} = k_BT\left(\frac{\partial\langle N\rangle}{\partial\mu}\right)_{T,V} \tag{2}$$

利用热力学关系$\left(\dfrac{\partial\mu}{\partial p}\right)_{T,V} = v$ 及式(2)求得 N

的相对涨落

$$\sqrt{\frac{\langle(\Delta N)^2\rangle}{\langle N\rangle^2}}=\sqrt{\frac{k_BT}{\langle N\rangle^2}\left(\frac{\partial\langle N\rangle}{\partial\mu}\right)_{T,V}}$$

$$=\sqrt{\frac{k_BT}{V}\kappa_T} \qquad (3)$$

式中 μ 是化学势，$v=\frac{V}{\langle N\rangle}$是比容，$\kappa_T=-\frac{1}{v}\cdot\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_{T,V}$是等温压缩率。

巨正则系综的广义力涨落公式 generalized force fluctuation formula of grand canonical ensemble 系统对外界作用的广义力微观表达式为

$$X_i=-\frac{\partial E}{\partial x_i} \qquad (i=1,2,\cdots) \qquad (1)$$

式中 x_i 是系统的广义坐标。X_i 的统计平均值为

$$\langle X_i\rangle=-\left\langle\frac{\partial E}{\partial x_i}\right\rangle=k_BT\frac{\partial}{\partial x_i}\ln\mathscr{Z}$$

$$=-\frac{\partial J}{\partial x_i} \qquad (i=1,2,\cdots) \qquad (2)$$

它是一宏观量，式中 $\mathscr{Z}$是巨配分函数，J 为巨热力势。将下式

$$e^{-J/k_BT}=\sum_{N=0}^{\infty}[h^{-Nr}(N!)^{-1}e^{\mu N/k_BT}$$

$$\cdot\iint e^{-E^{(N)}(p,q)/k_BT}\mathrm{d}p\mathrm{d}q] \qquad (3)$$

两端对 x_i 求导两次，即可得到广义力涨落公式

$$\langle(X_i-\langle X_i\rangle)^2\rangle=\langle X_i^2\rangle-\langle X_i\rangle^2$$

$$=k_BT\left(\left\langle\frac{\partial X_i}{\partial x_i}\right\rangle-\frac{\partial\langle X_i\rangle}{\partial x_i}\right)$$

$$(i=1,2,\cdots) \qquad (4)$$

等温–等压系综 isothermal-isopiestic ensemble 又称 $T-p$ 系综（T：温度，p：压强），是由大数 M 个相同的、与大热源和恒压强源交换能量并达到平衡，而粒子数 N 固定的系统组成的系综。系统的 T、p 和 N 是确定的，但能量 E 和体积 V 出现涨落。注意到系统与媒质（包括大热源和恒压强源）间是用可动分界面隔开的。系综的独立宏观状态参量是 T、p 和 N

等温–等压分布 isothermal-isopiestic distribution 又称 $T-p$ 分布，是等温–等压系综按微观态的一种最概然分布。如图所示，将大数 M 个相同的系统（闭系）排列在不同的位置上，

N|— N|— N|—·····— N|
1　　2　　3　　　　　　M

因而是可分辨的，其中任意一个作为研究的系统，其余 $M-1$ 个起着大热源和恒压强源的作用，彼此相互接触并达到热平衡和力平衡，忽略能量中的相互作用项。应用等概率原理可求出含系综微观态数最多的一种宏观分布 $\{M(E_j(V),V)\}=(M(E_1(V),V),M(E_2(V),V),\cdots,M(E_j(V),V),\cdots)$，从而得到系统处于能量为 $E_j(V)$的微观态 j，而体积在（V，$V+\mathrm{d}V$）间隔的概率即 $T-p$ 分布

$$w(E_j(V),V)\mathrm{d}V=\frac{M(E_j(V),V)}{M}\mathrm{d}V$$

$$=Y^{-1}e^{-\frac{E_j(V)+pV}{k_BT}}\mathrm{d}V \qquad (1)$$

式中 $M(E_j(V),V)$是处于体积为 V、能量为 $E_j(V)$的微观态 j 的系统数。

$$Y(T,p,N)$$

$$=\int_0^{\infty}\sum_j e^{-(E_j(V)+pV)/k_BT}\mathrm{d}V \qquad (2)$$

称为 $T-p$ 配分函数或等温–等压配分函数，其意义是先将系统出现在体积 V 固定下各微观态 j 的相对概率相加，再对连续变量 V 积分。Y 是一个非常重要的量，所有热力学函数均可用它来表示。$T-p$ 分布和配分函数在相空间可表示为

$$\rho_V(p,q)\mathrm{d}V=Y^{-1}e^{-\frac{1}{k_BT}(E(V)+pV)}\mathrm{d}V \qquad (3)$$

$$Y=\frac{1}{N!h^{Nr}}\int_0^{\infty}\iint e^{-E_V(p,q)/k_BT}$$

$$\cdot e^{-pV/k_BT}\mathrm{d}p\mathrm{d}q\mathrm{d}V \qquad (4)$$

其中 ρ_V 称为 $T-p$ 系综分布函数或概率密度。注意在应用式（3）和（4）计算时，要取式中的 $\frac{1}{k_BT}$和$\frac{p}{k_BT}$为独立变量。

等温–等压配分函数 isothermal-isopiestic partition function 见“等温–等压分布”。

等温-等压系综的热力学函数 thermodynamic function of isothermal-isopiestic ensemble 等温-等压配分函数 $Y(T,p,N)$的对数 $\ln Y$ 是一广延量,可以预料,$\ln Y$ 一定和属于广延量的热力学函数有密切的联系。为此,选取温度 T、压强 p 和粒子数 N 为独立变量,热力学中吉布斯函数 G 的全微分表示式为

$$\mathrm{d}G=-S\mathrm{d}T+V\mathrm{d}p+\mu\mathrm{d}N \quad (1)$$

显然有

$$-\left[\frac{\partial}{\partial p}(k_BT\ln Y)\right]_{T,N}=Y^{-1}\int\sum_j \mathrm{e}^{-(E_j(V)+pV)/k_BT}V\mathrm{d}V=\langle V\rangle=\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N} \quad (2)$$

于是得到吉布斯函数 $G(T,p,N)$的统计表示式

$$G=-k_BT\ln Y \quad (3)$$

它是 $T-p$ 系综的基本公式之一,G 可视为 $T-p$ 系综的特征函数。由式(3)可以得到熵 S、焓 H 和内能 U 的表示式

$$S=-\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_{p,N}=k_B\ln Y+k_BT\frac{\partial\ln Y}{\partial T} \quad (4)$$

$$H=G+TS=k_BT^2\frac{\partial\ln Y}{\partial T} \quad (5)$$

$$U=H-p\langle V\rangle=k_BT^2\frac{\partial\ln Y}{\partial T}-p\langle V\rangle \quad (6)$$

U 和 S 也可直接利用 $T-p$ 分布求得。如果系统的外参量除 V 外,还有 $x_i(i=1,2,\cdots,n)$,则与广义坐标 x_i 对应的广义力 X_i 的统计平均值(除 p 外)为

$$\langle X_i\rangle=Y^{-1}\int\sum_j\left[\left(-\frac{\partial E_j(V)}{\partial x_i}\right)\times w(E_j(V),V)\right]\mathrm{d}V=k_BT\frac{\partial\ln Y}{\partial x_i}(i=1,2,\cdots,n) \quad (7)$$

式(7)中 w 为 $T-p$ 分布。

等温-等压系综的吉布斯函数公式 Gibbs function formula of isothermal-isopiestic ensemble 见“等温-等压系综的热力学函数”。

等温-等压系综的能量涨落公式 energy fluctuation formula of isothermal-isopiestic ensemble 按统计平均值的定义,应用 $T-p$ 分布,即可求得等温-等压系综的能量均方涨落公式

$$\langle(\Delta E)^2\rangle=\langle E^2\rangle-\langle E\rangle^2=\left(\frac{\partial^2\ln Y}{\partial\beta^2}\right)_{\beta p,N}=k_BT^2\left(\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}\right)_{\beta p,N} \quad (1)$$

式中 $\beta=\frac{1}{k_BT}$,Y 是 $T-p$ 配分函数。式(1)可化为

$$\langle(\Delta E)^2\rangle_{T-p}=\langle(\Delta E)^2\rangle_{正则}+\langle(\Delta V)^2\rangle\left(\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial\langle V\rangle}\right)^2_{T,N} \quad (2)$$

式(2)右端第一项表示系统与大热源通过热接触交换能量引起的涨落,即正则系综的涨落;第二项是系统通过作功与外功源交换能量引起的涨落,$\langle(\Delta V)^2\rangle$是系统体积的均方涨落。

等温-等压系综的体积涨落公式 volume fluctuation formula of isothermal-isopiestic ensemble 按统计平均值的定义,利用 $T-p$ 分布,即可求得体积 V 的一次矩和二次矩

$$\langle V\rangle=-\frac{1}{\beta}\frac{\partial\ln Y}{\partial p}=\left(\frac{\partial G}{\partial p}\right)_{T,N},\quad \langle V^2\rangle=\frac{1}{\beta^2}\frac{1}{Y}\frac{\partial^2 Y}{\partial p^2} \quad (1)$$

式中 $\beta=\frac{1}{k_BT}$,Y 是 $T-p$ 配分函数,G 为吉布斯函数,由此得到体积的均方涨落和相对涨落公式

$$\langle(\Delta V)^2\rangle=\langle V^2\rangle-\langle V\rangle^2=\frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\ln Y}{\partial p^2}=-\frac{1}{\beta}\left(\frac{\partial^2 G}{\partial p^2}\right)_{T,N}=-k_BT\left(\frac{\partial\langle V\rangle}{\partial p}\right)_{T,N}=k_BTV\kappa_T \quad (2)$$

$$\sqrt{\frac{\langle(\Delta V)^2\rangle}{\langle V\rangle^2}}=\sqrt{\frac{k_BT\kappa_T}{\langle V\rangle}} \quad (3)$$

式中 κ_T 是等温压缩系数。

等温-等压系综的广义力(除压强外)涨落公式 generalized force (except for pressure) fluctuation formula of isothermal-isopiestic ensemble

系统对外界作用力的微观表达式为

$$X_i=-\frac{\partial E}{\partial x_i}(i=1,2,\cdots) \qquad (1)$$

式中 x_i 是系统的广义坐标，X_i 为相应的广义力，其统计平均值可表示为

$$\langle X_i\rangle=-\left\langle\frac{\partial E}{\partial x_i}\right\rangle=k_BT\,\frac{\partial \ln Y}{\partial x_i}$$

$$=-\frac{\partial G}{\partial x_i}\quad(i=1,2,\cdots) \qquad (2)$$

它是一宏观量，式中 Y 是 $T-p$ 配分函数，G 为吉布斯函数。注意式(2)对压强不成立。将下式

$$e^{-G/k_BT}=(N\,!)^{-1}h^{-Nr}\cdot\int_0^{\infty}\iint e^{-\frac{1}{k_BT}(E_V(p,q)+pV)}\mathrm{d}p\,\mathrm{d}q\,\mathrm{d}V \qquad (3)$$

两端对 x_i 求导两次，即可得到广义力涨落公式

$$\langle(X_i-\langle X_i\rangle)^2\rangle=\langle X_i^2\rangle-\langle X_i\rangle^2$$

$$=k_BT\left[\left\langle\frac{\partial X_i}{\partial x_i}\right\rangle-\frac{\partial\langle X_i\rangle}{\partial x_i}\right]$$

$$(i=1,2,\cdots) \qquad (4)$$

四种系综之间的关系 relationship between four kinds of ensembles　微正则、正则、等温-等压和巨正则系综分别描述孤立系、闭系和开系等不同系统的统计性质和统计规律，但从等概率原理即微正则系综出发，可导出处于各种不同外界条件下的系统按其微观态的概率分布，即其他几种系综分布。它们之间不仅有着密切的联系，且在处理实际问题时是等价的。

(1)巨正则系综与正则系综的关系　它们的区别在于系统的粒子数是否可变。从下式

$$\mathscr{Z}=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{j(N)}e^{-(E_{j(N)}-\mu N)/k_BT}$$

$$=\sum_{N=0}^{\infty}e^{\beta\mu N}Z_N\quad\left[\beta=\frac{1}{k_BT}\right] \qquad (1)$$

看出，当化学势 μ 和粒子数 N 为常数时，巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 变为正则配分函数 Z_N。式(1)求和必须收敛才有意义，故其中必含一极大项，设为

$e^{\beta\mu N^*}Z_N(N^*)=\mathscr{Z}^*$，且满足

$\frac{\partial}{\partial N}\ln(e^{\beta\mu N}Z_N)|_{N=N^*}=0$。将式(1)中的 $e^{\beta\mu N}Z_N$ 的对数在 N^* 处作泰勒展开，并取至二次项：

$$\mathscr{Z}=\sum_{N=0}^{\infty}\mathscr{Z}^*\exp\left[-\frac{1}{2}\zeta N^{*2}\left(1-\frac{N}{N^*}\right)^2\right],$$

$$\zeta=-\frac{\partial^2}{\partial N^2}\ln Z_N|_{N=N^*} \qquad (2)$$

就单原子理想气体可估算出 $\frac{1}{2}\zeta N^{*2}=\frac{N^*}{2}$，因 N^* 很大，故式(2)求和中各项的值几乎均集中在 $\frac{N}{N^*}=1$ 处附近，如图 1 所示。这表明开系在处于平衡态时其粒子数围绕 N^* 的相对涨落非常小，由式(2)可求得开系的平均粒子数 $\langle N\rangle=N^*$。若设 N^* 为某一闭系的粒子数，则处于平衡态的开系与此闭系是等价的，两者的宏观量或者相应的系综的统计平均值是相同的。

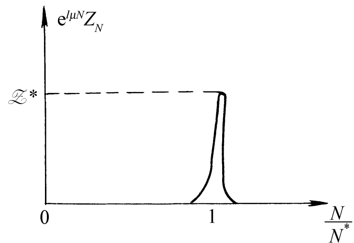


图 1

(2)等温-等压系综与正则系综的关系　它们的区别在于系统的体积是否可变。等温-等压配分函数可表示为

$$Y=\int_0^{\infty}\sum_j e^{-(E_j(V)+pV)/k_BT}\mathrm{d}V$$

$$=\int_0^{\infty}Z(T,V,N)e^{-pV/k_BT}\mathrm{d}V \qquad (3)$$

在压强 p 和体积 V 为常数时，式(3)变为正则配分函数 $Z(T,V,N)$。与式(1)中的讨论完全类似，式(3)被积函数存在极大值，设为 $e^{-pV^*/k_BT}\cdot Z(V^*)=Y^*$，积分值绝大部分集

中在$\frac{V}{V^*}=1$处附近，如图2所示。这表明等温-等压系统在处于平衡态时其体积V围绕V^*的相对涨落非常小，并可求出$\langle V\rangle=V^*$。若设V^*为组成正则系综的系统的体积，则处于平衡态的T-p系统与此系统是等价的，两者的宏观量或相应的系综的统计平均值是相同的。

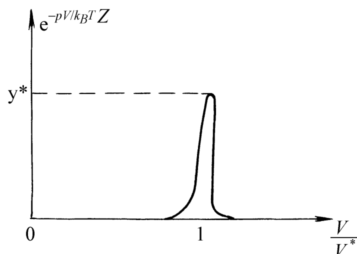


图2

(3)正则系综与微正则系综的关系　它们的区别在于系统的能量是否可变。由正则分布和正则配分函数表示式

$$W_i=\frac{1}{Z}\Omega(E_i)e^{-E_i/k_BT},$$

$$Z=\sum_i\Omega(E_i)e^{-E_i/k_BT} \tag{4}$$

看出，当能量E为常数时，正则分布变为微正则分布。式(4)中求和必须收敛，故其中必含有一极大项，设为$\Omega(E^*)e^{-E^*/k_BT}=Z^*$，并满足

$$\frac{\partial}{\partial E}\ln(\Omega(E)e^{-E/k_BT})|_{E=E^*}=0,$$

将式(4)求和中任意项的对数$\ln\Omega(E)e^{-E/k_BT}$在E^*处作泰勒展开，并取至二次项，得到

$$Z=\sum_E Z^*\exp\left[-\frac{1}{2}\eta E^{*2}\left(1-\frac{E}{E^*}\right)^2\right]$$

$$\eta=-\frac{\partial^2}{\partial E^2}\ln\Omega(E)|_{E=E^*} \tag{5}$$

就单原子理想气体可估算出$\frac{1}{2}\eta E^{*2}\approx\frac{3}{4}N$，因$N$很大，故式(5)求和中各项值几乎都集中在$\frac{E}{E^*}=1$附近，如图3所示。这表明正则系综描述的闭系处于平衡态时的能量E围绕E^*的相对涨落非常小，并可证明$\langle E\rangle=E^*$，由于闭系出现的概率集中在E^*附近，因此，若设某一孤立系的能量为E^*，则处于平衡态的闭系与此孤立系是等价的，因而正则系综和微正则系综的统计平均值是相等的。

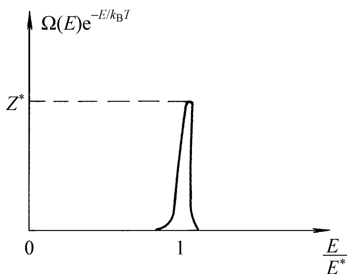


图3

综上所述，对于一平衡系统，不论它所处的宏观条件如何，用几种系综算出的统计平均值必定相同。存在这种等价性原因在于系统的粒子数N非常大，因而粒子数、体积或能量的相对涨落都非常小，于是系综的概率分布中有一尖锐的极大值，致使系统出现的概率集中在极大值附近的很小的区域内，所以，它们的宏观性质应该相同。几种系综的差别主要是粒子数、能量或体积是否可变或存在涨落。

巨正则系综与正则系综的关系　relationship between grand canonical ensemble and canonical ensemble　见“四种系综之间的关系”。

等温-等压系综与正则系综的关系　relationship between isothermal-isopiestic ensemble and canonical ensemble　见“四种系综之间的关系”。

正则系综与微正则系综的关系　relationship between canonical ensemble and microcanonical ensemble　见“四种系综之间的关系”。

非理想气体　non-ideal gas　分子间相互作用力不可忽略的真实气体。真实气体都偏离理想气体，特别是在温度比较低、密度比较大的

情况下，这种差别尤为显著。由于分子间相互作用力不同，非理想气体的物态方程也有多种，其中最一般的形式是 1908 年荷兰物理学家昂内斯（Onnes）提出的昂内斯方程

$$pV=A+\frac{B}{V}+\frac{C}{V^2}+\frac{D}{V^3}+\cdots$$

式中系数 $A=nRT$（n 是物质的量），B、C、…都是温度 T 的函数，分别称为第一、第二、第三、…位力（Virial）系数，它们通常由实验确定。理想气体物态方程和范德瓦尔斯方程分别是一级和二级近似下的昂内斯方程。

昂内斯方程　Onnes equation　见“非理想气体”。

位力系数　virial coefficient　见“非理想气体”。

二粒子相互作用势　two-particle interaction potential　非理想气体的宏观性质与粒子间相互作用势密切相关。对分子间相互作用势是以实验为基础，采用一些简化的模型来描述的。由于分子作用力程不过是分子本身大小的几倍，若分子数密度不是很高，则三个分子同时进入同一力程内的概率是很小的，可以说二体相互作用占了绝对优势。这里介绍几种典型的二粒子相互作用势，以 $u(r)$ 来表示，r 是分子质心间距离。

（1）实心势模型　又称刚球模型，刚球分子占有一定的体积。

$$u(r)=\begin{cases}\infty & r\leqslant\sigma\\ 0 & r>\sigma\end{cases}\tag{1}$$

其中 σ 为实心半径。如图 1 所示。

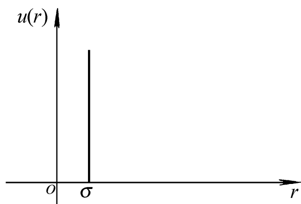


图 1

（2）方阱势模型　有一半径为 σ 的实心和宽为 $(t-1)\sigma$、深为 ϕ 的方形吸引区域。

$$u(r)=\begin{cases}\infty & 0<r<\sigma\\ -\phi & \sigma<r<t\sigma\\ 0 & r>t\sigma\end{cases}\tag{2}$$

如图 2 所示。

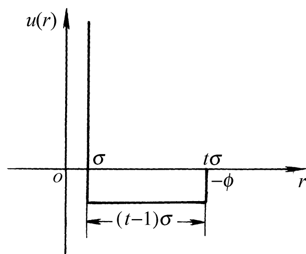


图 2

（3）苏则朗（Sutherland）势模型　在实心势基础上，考虑有吸引力。它也是一种简化的勒纳-琼斯势模型。

$$u(r)=\begin{cases}\infty & r<\sigma\\ -\phi_0\left(\dfrac{\sigma}{r}\right)^l & r>\sigma\end{cases}\tag{3}$$

式(3)中 l 是一常数，通常 $l=6$，$-\phi_0$ 是 $r=\sigma$ 时的势能。如图 3 所示。

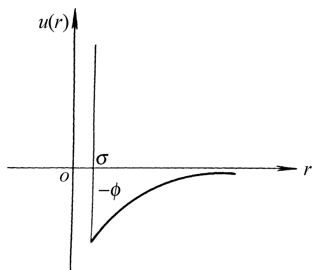


图 3

（4）勒纳-琼斯（Lennard-Jones）6-12 势　勒纳和琼斯 1924 年提出的一种很好的近似模型。$u(r)$ 表示为

$$u(r)=4\phi\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]\tag{4}$$

它基于如下事实：具有高能量的粒子，从某种程度上说，可以进入实心，因而实心是逐渐倾斜的，当 $r=\sigma$ 时，$u(\sigma)=0$，故 σ 是实心的半

径，此时势能从正到负值，$r=2^{1/6}\sigma$ 是 L-J 势取极小值 $-\phi$ 时的位置，即 $u(2^{1/6}\sigma)\equiv-\phi_0$。如图 4 所示。

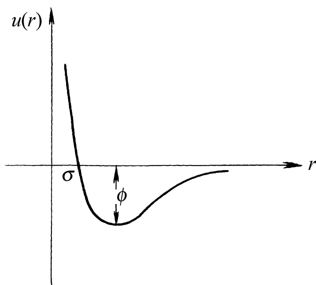


图 4

以上每种势能模型都有某一物态方程与之对应，例如苏则朗模型对应于范德瓦尔斯方程，L-J 6-12 势模型大致对应于昂内斯方程。

实心势模型 hard-core potential model 见"二粒子相互作用势"。

方阱势模型 square-well potential model 见"二粒子相互作用势"。

苏则朗势模型 Sutherland potential model 见"二粒子相互作用势"。

勒纳-琼斯 6-12 势模型 Lennard-Jones 6-12 potential model 见"二粒子相互作用势"。

非理想气体的巨配分函数 grand partition function of non-ideal gas 为较透彻地了解非理想气体的热力学性质，微观上计算物态方程，需研究系统的巨配分函数

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!h^{3N}}e^{\beta N\mu}\times\int\cdots\int e^{-\beta H}\mathrm{d}\boldsymbol{p}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{p}_N\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N\quad\left(\beta=\frac{1}{k_BT}\right)\tag{1}$$

分子相互作用是二体的，它具有一很大的排斥作用的实心和短程相互吸引，系统的哈密顿量为

$$\begin{aligned}H&=\sum_i p_i^2/2m+\sum_{(ij)}u(\boldsymbol{r}_{ij})\\&=\sum_i p_i^2/2m+\sum_{1\leqslant i<j\leqslant N}u_{ij}\end{aligned}\tag{2}$$

式(1)被积函数中出现指数因子 $e^{-\beta\sum_{(ij)}u_{ij}}$，因此，引入函数

$$f_{ij}=e^{-\beta u_{ij}}-1=e^{-\frac{u_{ij}}{k_BT}}-1\tag{3}$$

是方便的，f_{ij}称为迈耶(Mayer)函数，它代表两分子的相互作用。当 r_{ij}超出相互作用范围时，$u_{ij}=0$，$f_{ij}=0$，而在实心范围时，$u_{ij}=\infty$，$f_{ij}=-1$，显然，f_{ij}作为展开的参量优于 u_{ij}。式(1)在对所有粒子的动量积分后变为

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!\lambda_T^{3N}}e^{\beta\mu N}K_N(T,V)\tag{4}$$

其中 $\lambda_T\equiv\left(\frac{\beta h^2}{2\pi m}\right)^{1/2}=\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$ 称为热波长，而

$$\begin{aligned}K_N(T,V)&=\int\cdots\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N e^{-\beta\sum_{(ij)}u_{ij}}\\&=\int\cdots\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N\prod_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)}(1+f_{ij})\\&\left(\prod_{(ij)}\equiv\prod_{1\leqslant i<j\leqslant N}\right)\end{aligned}\tag{5}$$

称为位形积分，它是关于 N 个分子处于所有可能位形的相对概率之和，故又称位形配分函数。

迈耶函数 Mayer function 见"非理想气体的巨配分函数"。

位形积分 configuration integral 见"非理想气体的巨配分函数"。

非理想气体的集团展开 cluster expansion of non-ideal gas 物态方程按气体密度作位力展开的微观表达式。1937 年前后 J. E. 迈耶(J. E. Mayer)夫妇和 H. D. 厄塞尔(H. D. Ursell)等人建立和发展起来的分子集团展开法是描述实际气体的一种很有效的方法，它适用于温度不太低、密度不太高的气体，甚至也适用于中等密度的流体。巨正则配分函数可表示为

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_{N=0}^{\infty}\frac{1}{N!\lambda_T^{3N}}e^{\beta\mu N}K_N(T,V)\quad\left(\beta=\frac{1}{k_BT}\right)\tag{1}$$

式中 $\lambda_T\equiv\left(\frac{\beta h^2}{2\pi m}\right)^{1/2}$ 是热波长，位形积分 $K_N(T,V)$可写作

$$K_N(T,V)=\int\cdots\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N e^{-\beta\sum_{(ij)}u_{ij}}$$

$$= \int \cdots \int d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_N \prod_{\langle ij \rangle}^{\frac{1}{2}N(N-1)} (1 + f_{ij})$$

$$\left[\prod_{\langle ij \rangle} \equiv \prod_{1 \leqslant i < j \leqslant N} \right] \quad (2)$$

其中 $f_{ij} = e^{-\beta u_{ij}} - 1$ 是迈耶函数。将式(2)展开,则有

$$K_N = \int \cdots \int d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_N \left[1 + \sum_{i<j} f_{ij} + \sum_{i<j} \sum_{i'<j'} f_{ij} f_{i'j'} + \sum \sum \sum fff + \cdots \right] \quad (3)$$

把彼此有直接或间接相互作用的所有粒子称为一个粒子集团,定义 l-粒子集团积分为

$$b_l = \frac{1}{l\,!\,V} \int \cdots \int d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_l \sum \prod_{1 \leqslant i < j \leqslant l} f_{ij} \quad (4)$$

右端积分号内连积 $\prod\limits_{1 \leqslant i < j \leqslant N}$ 是 l 个粒子相互作用的某一种组合态,而 $\sum\limits_{1 \leqslant i < j \leqslant N}$ 则是对所有可能的不同组合态求和。引进集团函数 $U_l(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_l)$:

$$U_l(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_l) = \sum \prod_{1 \leqslant i < j \leqslant l} f_{ij} \quad (5)$$

U_l 又称为厄塞尔函数,可以用图来表示它。一个 l-粒子集团用一个 l-粒子的图来表示,图中所有标明代表粒子编号数字的圆是相互直接或间接联结的。将式(5)前 4 个 U_l 及其图表示如下:

$U_1(\boldsymbol{r}_1) = 1 =$ ①, $U_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = f_{12} =$ ①—②, $U_3(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3) = f_{12} f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{13} f_{23} =$ [图] + [图] + [图] + [图] = 3 [图] + [图], $U_4(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4) = \underbrace{f_{12} f_{23} f_{34} + \cdots}_{12项} + \underbrace{f_{12} f_{13} f_{14} + \cdots}_{4项} + \underbrace{f_{12} f_{23} f_{34} f_{14} + \cdots}_{3项} + \underbrace{f_{12} f_{23} f_{34} f_{24} + \cdots}_{12项} + \underbrace{f_{12} f_{23} f_{34} f_{14} f_{13} + \cdots}_{6项} + f_{12} f_{23} f_{34} f_{14} f_{13} f_{24} = 12$ [图] + 4 [图] + 3 [图] + 12 [图] + 6 [图] + [图]。可见,集团函数具有特别的意义,一个 N-粒子集团函数 $U_N(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ 只有当所有 N 个粒子都有相互作用时才不等于零。将式(4)用 U_l 表示为

$$b_l = \frac{1}{l\,!\,V} \int \cdots \int d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_l U_l(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_l) \quad (6)$$

N 个粒子的气体处于某种集团分布状态 $\{m_l\}$,那就是说有单个分子状态 m_1 个,两分子的集团 m_2 个,…,l 个分子的集团 m_l 个。显然,满足以下条件

$$\sum_{l=1} l m_l = N \quad (7)$$

按排列组合方法,与这种分布对应的微观状态数是

$$\prod_l \frac{N\,!}{m_l\,!(l\,!)^{m_l}} \quad (8)$$

利用式(6)并注意到式(7)和(8),可将式(3)变为

$$K_N = \sum_{\substack{\{m_l\} \\ \sum l m_l = N}} \frac{N\,!}{\prod_l (l\,!)^{m_l} m_l\,!} \prod_l (l\,!\,V b_l)^{m_l}$$

$$= N\,! \sum_{\substack{\{m_l\} \\ \sum l m_l = N}} \prod_l \frac{(V b_l)^{m_l}}{m_l\,!} \quad (9)$$

将式(9)代入式(1),即可得到巨配分函数 $\mathscr{Z}$、巨热力势 J、物态方程及粒子数平均值 $\langle N \rangle$ 的表达式

$$\mathscr{Z} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\substack{\{m_l\} \\ \sum l m_l = N}} \left[\frac{e^{\mu/k_B T}}{\lambda_T^3} \right]^{\sum l m_l} \prod_{l=1}^{N} \frac{(V b_l)^{m_l}}{m_l\,!}$$

$$= \prod_{l=1}^{\infty} \sum_{m_l=0}^{\infty} \frac{1}{m_l\,!} (b_l \zeta^l V)^{m_l}$$

$$= \prod_{l=1}^{\infty} \exp(\zeta^l V b_l)$$

$$= \exp\left[V \sum_{l=1}^{\infty} b_l \zeta^l \right] \quad (10)$$

$$J = -k_B T \ln \mathscr{Z} = -k_B T V \sum_{l=1}^{\infty} (b_l \zeta^l) \quad (11)$$

$$p = -\left(\frac{\partial J}{\partial V} \right)_{T, \langle N \rangle} = k_B T \sum_{l=1}^{\infty} b_l \zeta^l \quad (12)$$

$$\langle N\rangle=-\left(\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)_{T,V}=V\sum_{l=1}^{\infty}b_l l\zeta^l$$

或
$$v^{-1}=\sum_{l=1}^{\infty}lb_l\zeta^l \tag{13}$$

其中已令$\frac{e^{\mu/k_BT}}{\lambda_T^3}\equiv\zeta$，$v\equiv\frac{V}{\langle N\rangle}$是比容。式(12)和(13)称为迈耶-厄塞尔集团展开式。若将式(12)和(13)代入物态方程的位力展开式

$$\frac{pV}{\langle N\rangle k_BT}=\sum_{l=1}^{\infty}B_l(T)\left[\frac{\langle N\rangle}{V}\right]^{l-1} \tag{14}$$

则可得到位力系数 B_m 与集团积分 b_l 的关系

$$B_1=b_1=1,\ B_2=-b_2,\ B_3=4b^2-2b_3,\ B_4=-20b_2^3+18b_2b_3-3b_4,\cdots \tag{15}$$

由式(12)和(13)消去$\zeta\equiv\frac{e^{\mu/k_BT}}{\lambda_T^3}$，可得下述形式的物态方程

$$p=\frac{k_BT}{v}\left[1-\sum_{s=1}^{\infty}\frac{s}{s+1}\beta_s v^{-s}\right] \tag{16}$$

式中 β_s 是不可约集团积分，它的定义式为

$$\beta_k=\frac{1}{k!V}\int\cdots\int\sum_{1\leqslant i<j\leqslant k+1}\prod f_{ij}d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_{k+1} \tag{17}$$

β_s 与集团积分 b_l 之间的关系由下式给出

$$l^2b_l=\sum_{m_s}\prod_s\frac{1}{m_s!}(l\beta_s)^{m_s} \tag{18}$$

并有约束条件 $\sum sm_s=l-1$。由式(18)可以算出

$$b_1=1,\ b_2=\frac{\beta_1}{2},\ b_3=\frac{1}{2}\beta_1^2+\frac{1}{3}\beta_2,$$

$$b_4=\frac{2}{3}\beta_1^3+\beta_1\beta_2+\frac{1}{4}\beta_3,\cdots \tag{19}$$

比较式(14)和(16)右端$\frac{1}{v}=\frac{\langle N\rangle}{V}$的同幂次的系数，即得

$$B_1(T)=1,\ B_2(T)=-\frac{\beta_1}{2},$$

$$B_3(T)=-\frac{2}{3}\beta_2,\cdots \tag{20}$$

可以看出，集团积分 b_l 可分解成各种更简单的积分 β_s 的组合，而这些 β_s 是不能再分解的积分形式，故称 β_s 为不可约集团积分(相应的粒子的集合为不可约集团)。在厄塞尔和迈耶之后，Kahn，Uhlenbeck 和李政道、杨振宁等人又发展一种所谓量子集团展开方法，研究量子非理想气体。

集团积分 b_l cluster integral b_l 见“非理想气体的集团展开”。

集团函数 U_l cluster function U_l 见“非理想气体的集团展开”。

迈耶-厄塞尔集团展开式 Mayer-Ursell cluster expansion 见“非理想气体的集团展开”。

位力系数与集团积分的关系 relationship between virial coefficient and cluster integral 见“非理想气体的集团展开”。

不可约集团积分 irreducible cluster integral 见“非理想气体的集团展开”。

集团积分与不可约集团积分的关系 relationship between cluster integral and irreducible cluster integral 见“非理想气体的集团展开”。

位力系数与不可约集团积分的关系 relationship between virial coefficient and irreducible cluster integral 见“非理想气体的集团展开”。

第二位力系数 second virial coefficient 是对理想气体给出二体集团效应的修正。对于稀薄的气体，在粒子相互作用中，二粒子集团的贡献是主要的，故计算第二位力系数

$$B_2(T)=-\frac{1}{2V}\iint d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2f(\boldsymbol{r}_{12})$$
$$=-\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}_{12}(e^{-u(\boldsymbol{r}_{12})/k_BT}-1) \tag{1}$$

非常重要。若粒子相互作用势 $u(\boldsymbol{r}_{12})$是球形对称的，则有 $u(\boldsymbol{r}_{12})\equiv u(|\boldsymbol{r}_{12}|)=u(r)$。就几种常用的势求出 B_2

(1)实心势 $u(r)=\begin{cases}\infty & r\leqslant\sigma\\ 0 & r>\sigma\end{cases}$，$B_2$ 和相应的物态方程为

$$B_2(T)=-\frac{1}{2}\int_0^{\sigma}4\pi r^2(-1)dr$$
$$=\frac{2}{3}\pi\sigma^3\equiv b_0$$
$$(B_2\text{ 与温度 }T\text{ 无关}) \tag{2}$$

$$\frac{pV}{\langle N\rangle k_BT}=1+\frac{2\pi\sigma^3}{3}\frac{\langle N\rangle}{V} \tag{3}$$

(2)方阱势

$$u(r)=\begin{cases}\infty & 0<r<\sigma\\ -\phi & \sigma<r<t\sigma\\ 0 & r>t\sigma\end{cases}$$，求得与温度有关的 $B_2(T)$：

$$B_2(T)=-\frac{1}{2}\left\{\int_0^\sigma(-1)4\pi r^2\mathrm{d}r+\int_\sigma^{t\sigma}(\mathrm{e}^{\beta\phi}-1)4\pi r^2\mathrm{d}r\right\}$$
$$=\frac{2\pi\sigma^3}{3}[1-(t^3-1)(\mathrm{e}^{\beta\phi}-1)]$$
$$\left(\beta=\frac{1}{k_BT}\right)\tag{4}$$

低温时，$B_2(T)$是负的，这是由于方阱势的吸引相互作用能量与热运动能量 k_BT 竞争而使压强低于理想气体压强；高温下实心占优势，相对于理想气体来说，压强增加了，因此，$B_2(T)$变为正的。

（3）苏则朗势

$$u(r)=\begin{cases}\infty & r<\sigma\\ -\phi_0\left(\dfrac{\sigma}{r}\right)^l & r>\sigma\end{cases}$$，取 $l=6$，设 $\dfrac{\phi_0}{k_BT}\ll1$，则有

$$B_2(T)=-\frac{4\pi}{2}\left\{\int_0^\sigma(-1)r^2\mathrm{d}r+\int_\sigma^\infty\left[\exp\left(\frac{\phi_0}{k_BT}\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6\right)-1\right]r^2\mathrm{d}r\right.$$
$$\approx\frac{2\pi\sigma^3}{3}\left(1-\frac{\phi_0}{k_BT}\right)\tag{5}$$

相应的物态方程为范德瓦尔斯方程：

$$\left(p+\frac{2\pi\sigma^3\phi_0}{3v^2}\right)\approx\frac{k_BT}{v}\left(1-\frac{2\pi\sigma^3}{3v}\right)^{-1}$$

或 $$\left(p+\frac{a}{v^2}\right)(v-b_0)=k_BT$$
$$\left(v=\frac{V}{\langle N\rangle}\right)\tag{6}$$

式中 $a=\dfrac{2\pi\sigma^3\phi_0}{3}$，$b_0=\dfrac{2\pi}{3}\sigma^3\equiv4v_0$，参量 b_0 是分子体积 v_0 的4倍。

（4）勒纳－琼斯6－12势　$u(r)=4\phi\times\left[\left(\dfrac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\dfrac{\sigma}{r}\right)^6\right]$，将式(1)分部积分，并作变换 $y=r/\sigma$，让 $T^0=\dfrac{k_BT}{\phi}$，$B_2^0(T)=\dfrac{B_2(T)}{b_0}$，求得

$$B_2^0(T)=\frac{4}{T^0}\int_0^\infty y^2\left(\frac{12}{y^{12}}-\frac{6}{y^6}\right)\times\exp\left[-\frac{4}{T^0}\left(\frac{1}{y^{12}}-\frac{1}{y^6}\right)\right]\mathrm{d}y$$
$$=\sum_{n=0}^\infty\alpha_n\left(\frac{1}{T^0}\right)^{(2n+1)/4}\tag{7}$$

式（7）中第二式是通过将 $\exp\left[\dfrac{4}{T^0}\left(\dfrac{1}{y}\right)^6\right]$ 展成无穷级数，并对其中每项作解析计算得到的，其中系数 α_n 为

$$\alpha_n=-\frac{2}{4n!}\Gamma\left(\frac{2n-1}{4}\right)\tag{8}$$

式(7)中级数对于 $T^0>4$ 的值收敛得快，若 T^0 值较低则收敛得慢。结果与实验符合得很好，同时还可确定 $u(r)$中参数值，例如氩气，则有 $\sigma=3.50$ Å，$\dfrac{\phi}{k_B}=118$ K。

第三位力系数 third virial coefficient　对于一般的实际气体，只考虑二体相互作用是不够的，必须对下述第三位力系数表示式

$$B_3(T)=4b_2^2-2b_3$$
$$=\left(\frac{1}{V}\iint\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2f_{12}\right)^2-\frac{2}{3!V}\cdot\iiint\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3(3f_{12}f_{13}+f_{12}f_{13}f_{23})$$
$$=-\frac{1}{3V}\iiint\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3f_{12}f_{13}f_{23}\tag{1}$$

加以修正，式中 b_2，b_3 是第二、第三集团积分。例如存在三体效应，将发生极化效应，产生一附加的三体极化互作用 Δu，并对 $B_3(T)$有影响，低温时，此影响更为显著。三体互作用势可表示为

$$u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)=u(\boldsymbol{r}_{12})+u(\boldsymbol{r}_{23})+u(\boldsymbol{r}_{13})+\Delta u(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3),$$
$$\Delta u=\frac{\xi(1+3\cos\theta_1\cos\theta_2\cos\theta_3)}{r_{12}r_{13}r_{23}}\tag{2}$$

其中 r_{ij}是二体构成的原子三角形边长，θ_i 是内角，ξ 为一与极化率以及二体互作用性质有关的参数。极化互作用是一排斥作用。第三位力系数变为

$$B_3(T)=B_3(T)^{add}+\Delta B_3(T) \quad (3)$$

其中 $B_3(T)^{add}$是与可相加势对应的第三位力系数即式(1),而修正部分 $\Delta B_3(T)$则由下式

$$\Delta B_3(T)=-\frac{1}{3V}\iiint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3[(\mathrm{e}^{-\Delta u/k_BT}-1)\cdot \mathrm{e}^{-(u_{12}+u_{13}+u_{23})/k_BT}] \quad (4)$$

给出。现简要介绍几种常用势模型 $B_3(T)^{add}$的计算。

(1)实心势。采用 Katsura 方法,设 $u(\boldsymbol{r}_{12})=u(|\boldsymbol{r}_{12}|)=u(r)$,注意到 $f(r)=\mathrm{e}^{-u(r)/k_BT}-1$,当 $r>\sigma$(实心半径)时,$f(r)=0$,当 $0<r<\sigma$ 时,$f(r)=-1$,因此,函数 $f(r)$的傅氏变换为

$$\begin{aligned}h(s)&=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}f(r)\\&=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{r}{s}f(r)\sin(sr)\\&=-\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\int_0^\sigma \mathrm{d}r\,\frac{r}{s}\sin(sr)\\&=-\sigma^3 J_{\frac{3}{2}}(\sigma s)/(\sigma s)^{3/2}\end{aligned} \quad (5)$$

式中 $J_{\frac{3}{2}}(\sigma s)$是贝塞尔函数,可以求得 $B_3(T)^{add}$:

$$\begin{aligned}B_3(T)^{add}&=-\frac{(2\pi)^{3/2}}{3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{s}h^3(s)\\&=\frac{5}{8}b_0^2=\frac{5}{8}\left(\frac{2\pi}{3}\sigma^3\right)^2\end{aligned} \quad (6)$$

其中应用了关系式

$$f(|\boldsymbol{r}_{13}-\boldsymbol{r}_{23}|)=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^{3/2}\int \mathrm{d}\boldsymbol{s}h^3(s)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{s}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)} \quad (7)$$

式(6)表明,$B_3(T)^{add}$与 T 无关,是正的,故使气体压强增加。

(2)方阱势。Kihara 用解析方法得到 $t\leqslant 2$ 时的公式

$$\begin{aligned}B_3(T)^{add}=\frac{b_0^2}{8}\Big[&5-(t^6-18t^4+32t^3\\&-15)x-(2t^6-36t^4+32t^3\\&+18t^2-16)x^2-(6t^6\\&-18t^4+18t^2-6)x^3\Big]\end{aligned} \quad (8)$$

其中 $b_0=\frac{2\pi}{3}\sigma^3$ 是分子体积的 4 倍,$(t-1)\sigma$ 为阱的宽度,ϕ 是阱的深度,$x=\mathrm{e}^{\phi/k_BT}-1$。对于 $t\geqslant 2$,则有

$$\begin{aligned}B_3(T)^{add}=\frac{b_0^2}{8}\Big[&5-17x-(32t^3\\&+18t^2+48)x^2-(5t^6\\&-32t^3+18t^2+26)x^3\Big]\end{aligned} \quad (9)$$

Sherwood 和 Prausmitz 不仅计算了 $B(T)^{add}$,而且还算出了 $\Delta B_3(T)$。发现在低温下,极化效应有着相当大的影响,加上修正部分 $\Delta B_3(T)$比单独的 $B_3(T)^{add}$其结果与实验符合得更好。

(3)勒纳-琼斯 6-12 势。采用与计算 $B_2(T)$类似解析方法计算 $B_3(T)$,但要复杂得多,求得的 $B_3(T)^{add}$的级数形式为

$$B_3(T)^{add}=b_0^2\sum_{n=0}^{\infty}\beta_n\left(\frac{1}{T^*}\right)^{-(n+1)/2} \quad (10)$$

其中 $T^*=k_BT/\phi$,系数 $\beta_n\sim n$ 的数据,可从文献上查到。

径向分布函数 radial distribution function 在与流体中任何一个粒子相距 r 处发现一个粒子的概率。首先定义 $n(<N)$体约化概率密度

$$R_n^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_n;T,V)\equiv\frac{N!}{(N-n)!}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N R^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N;T,V) \quad (1)$$

(正则系综)

$$R_n^\mu(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_n;T,V)\equiv\sum_{N=n}^{\infty}\frac{N!}{(N-n)!}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N R^\mu(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N;T,V) \quad (2)$$

(巨正则系综)

式中 R^N 和 R^μ 分别是正则系综和巨正则系综位形分布函数,它们都是粒子坐标的对称函数,且是归一化的。式(1)和(2)都是将系综的位形分布函数对 $N-n$ 个粒子的坐标积分后得到的。实际上,系综的位形分布函数 R^N 和 R^μ 分别是正则系综和巨正则系综的分布函数

对 N 个粒子的动量积分的结果。于是式(1)、(2)变为

$$R_n^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_n;T,V) = K_N^{-1}(T,V)\frac{N!}{(N-n)!}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \mathrm{e}^{-\sum\limits_{(ij)}u(r_{ij})/k_BT}$$

(正则系综) (3)

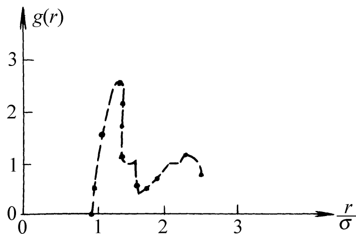
$$R_n^\mu(\boldsymbol{r}_1\cdots,\boldsymbol{r}_n;T,V) = \mathscr{Z}^{-1}(T,V,\mu)\sum_{N=n}^{\infty}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mu N/k_BT}}{(N-n)!\lambda_T^{3N}} \cdot\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \mathrm{e}^{-\sum\limits_{(ij)}u(r_{ij})/k_BT}\right]$$

(巨正则系综) (4)

这里考虑粒子间相互作用是二体效应,且相互作用势是球形对称的,因此 $u(\boldsymbol{r}_{ij})\equiv u(r_{ij})$,$\lambda_T\equiv\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$ 是热波长,K_N 是位形积分,$\mathscr{Z}$ 为巨配分函数。R_n^N 和 R_n^μ 两者都与发现任意 n 个粒子处于位置 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n$ 的概率密度成正比。当体积 V 足够大,粒子数 N 足够多时,式(3)、(4)分别化为 $R_n^N\simeq\left(\frac{N}{V}\right)^n$,$R_n^\mu\approx\left\langle\left(\frac{N}{V}\right)^n\right\rangle$。当 $n=2$ 时,$R_n^N=R_2^N$,$R_n^\mu=R_2^\mu$,定义径向分布函数

$$g_2^N(r;T,V)=\frac{V^2}{N^2}R_2^N(r;T,V)\quad(\text{正则系综})\qquad(5)$$

$$g_2^\mu(r;T,V)=\frac{V^2}{\langle N\rangle^2}R_2^\mu(r;T,V)\quad(\text{巨正则系综})\qquad(6)$$



氩气的径向分布函数实验曲线,
σ 是氩原子直径

由于 g_2^N(或 g_2^μ)可以从 X 射线散射实验或中子衍射实验上测得,所以,它具有直接的物理意义,是描述具有球形对称势的流体的特性一个重要而常用的量。有了径向分布函数,就可求出粒子数密度涨落的相关性,并可确定诸热力学量。图给出了 $p=180\mathrm{kPa}$,$T=91.8\mathrm{K}$ 氩气的径向分布函数的 X 射线散射实验曲线。

***n* 体约化概率密度 *n*-body reduced probability density** 见"径向分布函数"。

内能与径向分布函数的关系 relationship between internal energy and radial distribution function 径向分布函数由二体约化概率密度 R_2^N 定义为

$$g_2^N(r;T,V)=\frac{V^2}{N^2}R_2^N(r;T,V)\qquad(1)$$

以 $K_N(T,V)$ 表示位形积分,经典流体系统的内能为

$$U(T,V,N)=k_BT^2\frac{\partial\ln Z(T,V,N)}{\partial T} = k_BT^2\frac{\partial\ln\left(\frac{K_N(T,V)}{N!\lambda_T^{3N}}\right)}{\partial T} = k_BT^2\frac{\partial\ln[K_N(T,V)/\lambda_T^{3N}]}{\partial T}\qquad(2)$$

式中 Z 是正则配分函数,$\lambda_T=\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$ 是热波长。R_2^N 可表示成

$$R_2^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V) = K_N^{-1}(T,V)\frac{N!}{(N-2)!}\int\cdots\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N\mathrm{e}^{-\frac{1}{k_BT}\sum\limits_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)}u(\boldsymbol{r}_{ij})}\qquad(3)$$

由于 N 个粒子的势能是粒子坐标的对称函数,故 $\sum\limits_{(ij)}u(\boldsymbol{r}_{ij})=\frac{1}{2}N(N-1)u(\boldsymbol{r}_{ij})$,设粒子间相互作用势是球形对称势,则 $u(\boldsymbol{r}_{ij})=u(r_{ij})$,$R_2^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V)=R_2^N(\boldsymbol{r}_{12};T,V)$。由以上各式即得

$$U(T,V,N) = \frac{3}{2}Nk_BT+\frac{1}{2}\iint\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2[u(\boldsymbol{r}_{12}) \cdot R_2^N(\boldsymbol{r}_{12};T,V)]\qquad(4)$$

将式(4)中积分变数变换成相对坐标和质量中心坐标,并对后者积分,利用式(1),可以得到

$$U(T, V, N) = \frac{3}{2} Nk_B T + \frac{1}{2}\frac{N^2}{V}\int 4\pi r^2 u(r) g_2^N(r; T, V) \mathrm{d} r \quad (5)$$

式(4)、(5)右端第一项是动能部分,第二项是粒子相互作用对内能的贡献。若给出 $u(r)$,由实验测得 $g_2(r)$,就可算出 U。

物态方程与径向分布函数的关系 relationship between state equation and radial distribution function 径向分布函数由二体约化概率密度 R_2^N 定义为

$$g_2^N(r; T, V) = \frac{V^2}{N^2} R_2^N(r; T, V) \quad (1)$$

考虑一边长为 L 的箱子内,盛有 N 个粒子的气体(或流体),L 足够大,忽略边界效应,物态方程为

$$p = k_B T\left(\frac{\partial}{\partial V}\ln Z(T, V, N)\right)_{T,N} = k_B T\left[\frac{\partial}{\partial V}\ln\left(\frac{K_N(T, V)}{N!\lambda_T^{3N}}\right)\right]_{T,N} = \frac{k_B T L}{3V}\left(\frac{\partial \ln K_N(T, V)}{\partial L}\right)_{T,N} \quad (2)$$

作变数变换 $r_j = Lx_j$,式(2)中位形积分 $K_N(T, V)$ 取如下形式:

$$K_N(T, V) = \int_0^L \mathrm{d} r_1 \cdots \int_0^L \mathrm{d} r_{3N} e^{-\sum_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)} u(\boldsymbol{r}_{ij})/k_B T} = V^N \int_0^1 \cdots \int_0^1 \mathrm{d} x_1 \cdots \mathrm{d} x_{3N} e^{-\sum_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)} u(L\boldsymbol{X}_{ij})/k_B T} \quad (3)$$

由于 N 个粒子的势能是粒子坐标的对称函数,故有

$$\left(\frac{\partial \sum_{(ij)} u(L\boldsymbol{X}_{ij})}{\partial L}\right)_{T,N} = \sum_{(ij)} \frac{\partial \boldsymbol{r}_{ij}}{\partial L}\frac{\partial u(\boldsymbol{r}_{ij})}{\partial \boldsymbol{r}_{ij}} = \frac{1}{2} N(N-1) \frac{\partial u(\boldsymbol{r}_{12})}{\partial \boldsymbol{r}_{12}} \frac{\boldsymbol{r}_{12}}{L} \quad (4)$$

设 $u(\boldsymbol{r}_{ij})$ 是球形对称的,则 $u(\boldsymbol{r}_{ij}) = u(r_{ij})$,$R_2^N(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; T, V) = R(\boldsymbol{r}_{12}; T, V)$。利用下式

$$R_2^N(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; T, V) = K_N^{-1}(T, V)\frac{N!}{(N-2)!}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \cdots \mathrm{d}\boldsymbol{r}_N e^{-\frac{1}{k_B T}\sum_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)} u(\boldsymbol{r}_{ij})} \quad (5)$$

及式(3)、(4),可以得到物态方程的下述表达式

$$\frac{p}{k_B T} = \frac{N}{V} - \frac{1}{6k_B T V}\iint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\left[\boldsymbol{r}_{12} \cdot \frac{\partial u(\boldsymbol{r}_{12})}{\partial \boldsymbol{r}_{12}} R_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; T, V)\right] \quad (6)$$

由式(1)又可得出用径向分布函数表示的物态方程

$$\frac{p}{k_B T} = \frac{N}{V} - \frac{1}{6k_B T}\left(\frac{N}{V}\right)^2 \int_0^\infty \left[4\pi r^2 r \cdot \frac{\partial u(r)}{\partial r} g_2^N(r; T, V)\right] \mathrm{d} r \quad (7)$$

右端第二项是由于粒子相互作用引起的对理想气体压强的修正。若给出 $u(r)$,由实验测得 g_2^N,就可算出积分。

化学势与径向分布函数的关系 relationship between chemical potential and radial distribution function 径向分布函数由二体约化概率密度 R_2^N 定义为

$$g_2^N(r; T, V) = \frac{V^2}{N^2} R_2^N(r;, T, V) \quad (1)$$

由于粒子数 N 很大,则化学势 μ 可近似地表示为

$$\mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} \approx F(N, T, V) - F(N-1, T, V) = -k_B T \ln\frac{Z(N, T, V)}{Z(N-1, T, V)} = -k_B T \ln\left(\frac{K_N(T, V)}{K_{N-1}(T, V)}\right) + k_B T \ln\frac{N!}{(N-1)!} + 3k_B T \ln\lambda_T \quad (2)$$

式中 F 是自由能,$Z(T, V, N) = \frac{K_N(T, V)}{\lambda_T^{3N} N!}$ 是正则配分函数,K_N 和 K_{N-1} 是位形积分,$\lambda_T \equiv \left(\frac{h^2}{2\pi m k_B T}\right)^{1/2}$ 为热波长。将 N 个粒子的总势

能 U_0 写做

$$U_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N,\eta) = \sum_{j=2}^{N}\eta u(\boldsymbol{r}_{1j}) + \sum_{2\leqslant i<j\leqslant N} u(\boldsymbol{r}_{ij}) \quad (3)$$

其中引进了参量 η,右端节一项表示粒子 1 与粒子 2、…粒子 N 相互作用势之和,第二项是除粒子 1 外,其余 $N-1$ 个粒子相互作用势之和。K_N 可表示为

$$K_N(T,V,\eta) = \int\cdots\int e^{-\frac{1}{k_BT}U_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N,\eta)}d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_N \quad (4)$$

于是有 $K_N(T,V,\eta)|_{\eta=1} = K_N(T,V)$, $K_N(T,V,\eta)|_{\eta=0} = VK_{N-1}(T,V)$,从而得到

$$\ln\frac{K_N(T,V)}{K_{N-1}(T,V)} = \int_0^1 d\eta\frac{d\ln K_N(T,V,\eta)}{d\eta} + \ln V \quad (5)$$

再利用 R_2^N 的表达式

$$R_2^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V,\eta) = K_N(T,V,\eta)\frac{N!}{(N-2)!}\cdot\int\cdots\int d\boldsymbol{r}_3\cdots d\boldsymbol{r}_N e^{-\frac{1}{k_BT}U_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N,\eta)} \quad (6)$$

可求出化学势的表示式

$$\mu = k_BT\ln\left(\frac{N\lambda_T^3}{V}\right) - k_BT\int_0^1 d\eta\frac{d\ln K_N(T,V,\eta)}{d\eta}$$
$$= \ln\left(\frac{N\lambda_T^3}{V}\right) + \frac{1}{Nk_BT}\int_0^1 d\eta\iint d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 u(\boldsymbol{r}_{12})R_2^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V,\eta) \quad (7)$$

设相互作用势是球形对称的,则 $u(\boldsymbol{r}_{ij}) = u(r_{ij})$, $R_2^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V,\eta) = R_2^N(\boldsymbol{r}_{12};T,V,\eta)$,由式(1)又可得到用 g_2^N 表示的化学势的公式

$$\frac{\mu}{k_BT} = \ln\left(\frac{N\lambda_T^3}{V}\right) + \frac{N}{Vk_BT}\cdot\int_0^1 d\eta\int_0^\infty dr 4\pi r^2 u(r)g_2(r;T,V,\eta) \quad (8)$$

如果知道 $u(r)$ 和 g_2^N 的实验结果,即可算出 μ。

等温压缩率与径向分布函数的关系 relationship between isothermal compressibility and radial distribution function 对于巨正则系综,径向分布函数定义为

$$g_2^\mu(r;T,V) = \frac{V^2}{\langle N\rangle^2}R_2^\mu(r;T,V) \quad (1)$$

巨正则系综的 n 体约化概率密度的表示式为

$$R_n^\mu(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_n;T,V) = \mathscr{Z}^{-1}(T,V,\mu)\sum_{N=n}^{\infty}\left[\frac{e^{\mu N/k_BT}}{(N-n)!\lambda_T^{3N}}\cdot\int\cdots\int d\boldsymbol{r}_{n+1}\cdots d\boldsymbol{r}_N e^{-\sum_{(ij)}u(\boldsymbol{r}_{ij})/k_BT}\right] \quad (2)$$

式中 $\mathscr{Z}$ 是巨正则配分函数,$\lambda_T \equiv \left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$ 为热波长。于是有

$$\int\cdots\int d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_n R_n^\mu(\boldsymbol{r}_1,\cdots\boldsymbol{r}_n;T,V) = \left\langle\frac{N!}{(N-n)!}\right\rangle,$$

$$\langle N\rangle = \int d\boldsymbol{r}_1 R_1^\mu(\boldsymbol{r}_1;T,V) = \int d\boldsymbol{r}_2 R_1^\mu(\boldsymbol{r}_2;T,V),$$

$$\langle N^2\rangle - \langle N\rangle = \iint d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 R_2^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V) \quad (3)$$

利用巨正则系综粒子数涨落公式 $\frac{\langle(\Delta N)^2\rangle}{\langle N\rangle^2} = \frac{k_BT}{V}\kappa_T$,即得

$$\frac{\langle N\rangle k_BT}{V}\kappa_T = \frac{\langle N^2\rangle - \langle N\rangle^2}{\langle N\rangle} = \frac{1}{\langle N\rangle}\iint d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2\left[R_2^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V) - R_1^\mu(\boldsymbol{r}_1;T,V)R_1^\mu(\boldsymbol{r}_2;T,V)\right] + 1 \quad (4)$$

这就是用巨正则系综二体约化概率密度表示的等温压缩率 κ_T 方程。设相互作用势是球形对称的,则有 $u(\boldsymbol{r}_{ij}) = u(r_{ij})$, $R_2^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V) = R_2^\mu(\boldsymbol{r}_{12};T,V)$,由式(1)又可将式(4)化为用径向分布函数表示的压缩率方程

$$k_BT\left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_{T,\langle N\rangle} = \frac{\langle N\rangle}{V}k_BT\kappa_T = 1 + \langle n\rangle\int_0^\infty dr 4\pi r^2[g_2^\mu(r;T,V) - 1] \quad (5)$$

其中$\langle n\rangle=\frac{\langle N\rangle}{V}$。若知道由实验测得的$g_2^\mu$,可算出压缩率。

确定径向分布函数的近似方程 approximate equation determining radial distribution function

径向分布函数是研究气体或液体系统热力学性质的一个非常重要的量,可以说是一个有力的工具。然而求解它是很困难的,因为必须进行多重积分,而积分中变数之间在几何上又是关联的。这里简单介绍几种求解方法。

(1)博戈留波夫(Bogoliubov),玻恩(Bohn)和格林(Green),柯克伍德(Kirkwood)和伊翁(Yvon)方程,简称BBGKY方程。将巨正则系综的n体约化概率密度R_n^μ表示式两端对$\boldsymbol{r}_1$求导,利用

$$g_n^\mu=\left(\frac{V}{\langle N\rangle}\right)^n R_n^\mu \tag{1}$$

并令$n=2$,即可得到径向分布函数$g_2^\mu(r_{12})$所满足的积分-微分方程

$$-k_BT\frac{1}{g_2^\mu(r_{12})}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_1}g_2^\mu(r_{12})=\frac{\partial u(r_{12})}{\partial\boldsymbol{r}_1}+\frac{\langle n\rangle}{g_2^\mu(r_{12})}\int g_3^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\frac{\partial u(r_{13})}{\partial\boldsymbol{r}_1}\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 \tag{2}$$

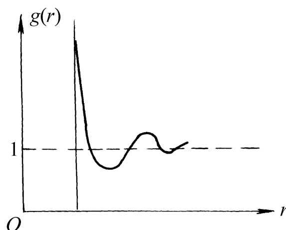
可以看出,此方程与三体分布函数$g_3^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)$有关,但为计算$g_3^\mu$,又必须知道$g_4^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4)$等等。为求解式(2),要设法将该式序列截断,柯克伍德首先提出叠置近似法,即用g_2^μ的乘积代替g_3^μ:

$$g_3^\mu(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)=g_2^\mu(r_{12})g_2^\mu(r_{13})g_2^\mu(r_{23}) \tag{3}$$

其物理意义是:在一给定的位形中,发现三个粒子的概率等于两两成对处于该位形(与第三个粒子的存在无关)概率的乘积。于是得到BBGKY方程

$$-k_BT\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_1}\left[\ln g_{BGY}^\mu(r_{12})\right]=\frac{\partial u(r_{12})}{\partial\boldsymbol{r}_1}+\langle n\rangle\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\left[\frac{\partial u(r_{13})}{\partial\boldsymbol{r}_1}\cdot g_{BGY}^\mu(r_{13})g_{BGY}^\mu(r_{23})\right] \tag{4}$$

这是一个封闭的积分—微分方程。虽然结果较好,但数值计算十分繁复,解析理论不能得到。下图给出用刚球模型算出的BBGKY方程的解$g(r)$-r曲线。



(2)柯克伍德(Kirkwood)方程 由柯克伍德和玻格斯(Boggs)提出。设N个粒子的总势能为

$$U_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots\boldsymbol{r}_N,\eta)=\sum_{j=2}^{N}\eta u(\boldsymbol{r}_{ij})+\sum_{2\leqslant i<j\leqslant N}u(\boldsymbol{r}_{ij}) \tag{5}$$

式中η是一参量。将正则系综的n体约化概率密度R_n^N的表示式两端对η求导后,再对η由0到η'积分,得到一积分方程,取$n=2$,并注意到

$$g_2^N(r,\eta)=\frac{V^2}{N^2}R_2^N(r,\eta),$$

$$g_3^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3;T,V,\eta)=\frac{V^3}{N^3}R_3^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3;T,V,\eta) \tag{6}$$

可得出相应的径向分布函数g_2^N所满足的方程

$$-k_BT\ln g_2^N(r_{12},\eta')=\eta' u_{12}-\frac{N}{V}\int_0^{\eta'}\mathrm{d}\eta\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_{12}u_{12}g_2^N(r_{12},\eta)+\frac{N}{V}\int_0^{\eta'}\mathrm{d}\eta\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3u_{13}g_3^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3;T,V,\eta)\left[g_2^N(r_{12},\eta)\right]^{-1} \tag{7}$$

对三体分布函数g_3^N运用叠置近似式(3),式(7)可简化为

$$-k_BT\ln g_K(r_{12},\eta')=\eta' u(r_{12})+\frac{N}{V}\int_0^{\eta'}\mathrm{d}\eta\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3u(\boldsymbol{r}_{13})g_K(r_{13},\eta)\left[g_K(r_{23},\eta)-1\right] \tag{8}$$

式(8)称为柯克伍德方程,必须用数值方法求

解。

(3)沃尔斯顿(Ornstein)-策尔尼克(Zernike)方程和佩克斯(Percus)-伊维克(Yevick)方程 是一种唯象理论。引入结构函数

$$h(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\equiv g(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)-1 \quad (9)$$

它是一相关函数,用来量度粒子间相互作用及几何约束对各个粒子的位置统计均匀性的影响。于是压缩率方程取如下形式

$$k_BT\left(\frac{\partial\langle n\rangle}{\partial p}\right)_T=1+\langle n\rangle\int h(r)\mathrm{d}\boldsymbol{r} \quad (10)$$

沃尔斯顿和策尔尼克提出将 $h(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=h(r_{12})$表示为

$$h(r_{12})=a(r_{12})+\langle n\rangle\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3 a(r_{13})h(r_{32}) \quad (11)$$

右端第一项描述粒子 1 和 2 间的直接关联,是短程关联;第二项是由其他邻近粒子对粒子 1,2 产生的关联,它是长程相关效应。对 $a(r_{12})$和 $h(r_{12})$作傅氏变换,式(11)变为

$$\frac{1}{k_BT}\left(\frac{\partial p}{\partial\langle n\rangle}\right)_T=1+\langle n\rangle\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}a(r) \quad (12)$$

由于在临界点附近$\left(\frac{\partial p}{\partial\langle n\rangle}\right)_T\to 0$,故 $a(r_{12})$保持短程关联。式(11)称为沃尔斯顿-策尔尼克方程。由 $g(r_{12})\propto \mathrm{e}^{-u(r_{12})/k_BT}$及式(9)得到启示,可以认为

$$a(r_{12})\approx f_{12}\equiv \mathrm{e}^{-u(r_{12})/k_BT}-1 \quad (13)$$

为使计算结果与实验及其他计算结果相符,须对式(13)修正,佩克斯和伊维克提出如下形式

$$a(r_{12})=(\mathrm{e}^{-u(r_{12})/k_BT}-1)\mathrm{e}^{u(r_{12})/k_BT}g(r_{12}) \quad (14)$$

将式(14)代入式(11),即得佩克斯-伊维克方程

$$g_{PY}(r_{12})=\mathrm{e}^{-\frac{u(r_{12})}{k_BT}}+\mathrm{e}^{-\frac{u(r_{12})}{k_BT}}\langle n\rangle\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\left[f(\boldsymbol{r}_{13})\cdot \mathrm{e}^{\frac{u(r_{13})}{k_BT}}g_{PY}(r_{13})h_{PY}(r_{32})\right] \quad (15)$$

由此方程所得的结果与蒙特卡罗及分子动力学计算结果相当一致。对于实心模型,应用式(15)可获得解析解,可见佩克斯-伊维克方程有着不少优点。

(4)超网络链(hyper-netted chain)方程 相当于让

$$a(r_{12})\approx h(r_{12})-\frac{1}{k_BT}[u(r_{12})-\varphi(r_{12})]$$

或

$$a_{HNC}(r_{12})=g_{HNC}(r_{12})-1-\frac{u(r_{12})}{k_BT}-\ln g_{HNC}(r_{12}) \quad (16)$$

代入式(11)所得到的方程。式(16)中 $\varphi(r_{12})=-k_BT\ln g(r_{12})$是所谓虚拟位势,它除包含粒子 2 对粒子 1 直接作用 $u(r_{12})$外,还含有围绕 2 的其他粒子的平均效应。超网络链方程取下述形式

$$\ln g_{HNC}(r_{12})=-\frac{u(r_{12})}{k_BT}+n\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\left[g_{HNC}(r_{13})-1-\ln g_{HNC}(r_{13})-\frac{u(r_{13})}{k_BT}\right](g_{HNC}(r_{32})-1) \quad (17)$$

式(17)是 $g_{HNC}(r_{12})$的一个封闭方程。计算结果与蒙特卡罗方法计算结果不大符合。

博戈留波夫,玻恩和格林,柯克伍德和伊翁(BBGKY)方程 Bogoliubov, Bohn and Green, Kirkwood and Yvon (BBGKY) equation 见“确定径向分布函数的近似方程”。

柯克伍德方程 Kirkwood equation 见“确定径向分布函数的近似方程”。

沃尔斯顿-策尔尼克方程 Ornstein-Zernike equation 见“确定径向分布函数的近似方程”。

佩克斯-伊维克方程 Percus-Yevick equation 见“确定径向分布函数的近似方程”。

超网络链方程 hyper-netted chain equation 见“确定径向分布函数的近似方程”。

兹万齐克微扰理论 Zwanzig perturbation theory 描述密度较高的流体热力学性质的一种较好的方法。兹万齐克认为密度较高的流体的定性行为主要取决于实心,而粒子间相互吸引势可当做对实心系统的一个微扰。N 个粒子的总势能为

$$U = U_0 + U_1 = U_0 + \sum_{(ij)} u_1(\boldsymbol{r}_{ij}) \quad (1)$$

式中 U_0 和 U_1 分别是相互作用势能的实心部分和吸引部分。位形自由能 F_c 与位形积分 K_N 的关系为

$$\mathrm{e}^{-\beta F_c} = \frac{K_N}{N!} = \frac{1}{N!}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \mathrm{e}^{-\beta U} \quad (2)$$

$$\left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right)$$

实心系统相应的量 $F_c^{(0)}$ 与 $K_N^{(0)}$、U_0 也有同样的关系，于是有

$$\mathrm{e}^{-\beta F_c} = \mathrm{e}^{-\beta F_c^{(0)}}\int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \rho_0(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\mathrm{e}^{-\beta U_1}$$

$$= \mathrm{e}^{-\beta F_c^{(0)}}\langle \mathrm{e}^{-\beta U_1}\rangle \quad (3)$$

式中 $\rho_0 = \mathrm{e}^{-\beta U_0}/K_N^{(0)}$ 是实心系统处于位形 $\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N$ 的概率密度。对式(3)取对数后作累积展开，得到下式

$$F_c = F_c^{(0)} + \langle U_1\rangle - \frac{\beta}{2}[\langle U_1^2\rangle - \langle U_1\rangle^2] + \cdots \quad (4)$$

根据实心系统二体约化概率密度 $R_2^{(0)}$ 的表达式及统计平均值的定义，可将总的相互吸引势的平均值写成

$$\begin{aligned}\langle U_1\rangle &= \int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N U_1 \rho_0 \\ &= \int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N U_1 \mathrm{e}^{-\beta U_0}/K_N^{(0)} \\ &= \frac{1}{2}\iint \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}\boldsymbol{r}_2 u_1(r_{12}) \\ &\quad \cdot R_2^{(0)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;T,V)\end{aligned} \quad (5)$$

其中使用了关系式 $U_1 = \sum_{(ij)}^{\frac{1}{2}N(N-1)} u_1(r_{ij}) = \frac{1}{2}N(N-1)u_1(r_{12})$，这是由于 N 个粒子的相互作用势能是粒子坐标的对称函数。再按照实心系统的径向分布函数 $g_2^{(0)}$ 的定义 $g_2^0 = \frac{V^2}{N^2}R_2^{(0)}$，求得

$$\langle U_1\rangle = \frac{1}{2}\frac{N^2}{V}\int \mathrm{d}r 4\pi r^2 u_1(r) g_2^{(0)}(r) \quad (6)$$

以上只取了累积展开中一级近似 $\langle U_1\rangle$，还可取 U_1 的更高次矩。不少学者用这种方法描述具有实心和弱相互作用系统获得了成功。

系综理论对麦克斯韦-玻尔兹曼气体的应用 application of ensemble theory to Maxwell-Boltzmann gas 麦克斯韦-玻尔兹曼(M-B)气体是遵从经典力学规律的近独立粒子系统。系统的 N 个粒子是可分辨的，若是由于坐标互换导致两个不同的单粒子态上粒子的交换，则系统变到一个物理上新的微观状态。与一给定的宏观分布 $\{n_j\}$ 相对应的系统微观状态数为

$$g_{M.B.}\{n_j\} = \frac{1}{N!}\left(\frac{N!}{\prod_j n_j!}\right) = \frac{1}{\prod_j n_j!},$$

$$n_j = 0,1,2,\cdots \quad (1)$$

式中因子 $\frac{1}{N!}$ 是粒子全同性原理所要求的，$n_j(j=1,2,\cdots)$ 是分布在各个单粒子态上的粒子数。$g_{M.B.}\{n_j\}$ 称为 M-B 统计权重因子。利用约束条件 $N = \sum_j n_j$，$E = \sum_j n_j \varepsilon_j$（$\varepsilon_j$ 是单粒子能量）可以求得巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 为

$$\begin{aligned}\mathscr{Z}(T,V,\mu) &= \sum_{\{n_j\}} g_{M.B.}\{n_j\} z^{\sum_j n_j} \mathrm{e}^{-\beta\sum_j n_j \varepsilon_j} \\ &= \sum_{\{n_j\}}\prod_j \frac{1}{n_j!}(z\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j} \\ &= \prod_j \sum_{n_j!}\frac{1}{n_j!}(z\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j} \\ &= \prod_j Z_j^{M.B.}\end{aligned} \quad (2)$$

$$Z_j^{M.B.} = \exp(z\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_j}) \quad (3)$$

式(2)中 $g_{M.B.}\{n_j\}$ 的作用是保证在对系统的微观态求和时避免重复计算。$\mathscr{Z} \equiv e^{\beta\mu}$ 是易逸度，$Z_j^{M.B.}$ 为与模式(单粒子态) j 对应的巨状态和，它可理解为某个模式 j 被 n_j 个粒子占据的相对概率之和。于是得到

$$\pi_j^{M.B.} = \frac{\sum_{n_j} n_j \frac{1}{n_j!}(z\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j}}{\sum_{n_j}\frac{1}{n_j!}(z\mathrm{e}^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j}} = \mathrm{e}^{-(\varepsilon_j-\mu)/k_B T} \quad (4)$$

$$N_i = g_i \mathrm{e}^{-(\varepsilon_i-\mu)/k_B T}$$

$$(g_i\text{：单粒子能量简并度}) \quad (5)$$

式(4)和(5)即 M-B 分布,也称玻尔兹曼分布,分别是按单粒子态和单粒子能量的最概然分布。若体积 V 足够大,则可将 $\ln\mathscr{Z}$中的求和 $\sum_j$ 变为积分 $\frac{V}{h^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{p}$,并注意到粒子的能量 $\varepsilon=\frac{p^2}{2m}$,计算得出

$$\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_j \mathrm{e}^{-\beta(\varepsilon_j-\mu)}=\frac{V}{\lambda_T^3}\mathrm{e}^{\mu/k_BT}$$

$$\left[\lambda_T\equiv\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}\text{是热波长}\right] \quad (6)$$

从而得到系统的巨热力势 J 及其他热力学量表示式

$$J=-k_BT\ln\mathscr{Z}=-\frac{k_BT}{\lambda_T^3}V\mathrm{e}^{\mu/k_BT} \quad (7)$$

$$\langle N\rangle=-\left(\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)_{T,V}=\frac{V}{\lambda_T^3}\mathrm{e}^{\mu/k_BT} \quad \text{(平均粒子数)} \quad (8)$$

$$pV=-J=k_BTV\mathrm{e}^{\mu/k_BT}\frac{1}{\lambda_T^3}=\langle N\rangle k_BT \quad \text{(物态方程)} \quad (9)$$

$$\mu=k_BT\ln\left(\frac{\langle N\rangle\lambda_T^3}{V}\right) \quad \text{(化学势)} \quad (10)$$

$$U=k_BT^2\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial T}=\frac{3}{2}\langle N\rangle k_BT\text{(内能)} \quad (11)$$

$$S=-\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{V,\mu}=\frac{5}{2}k_B\langle N\rangle-k_B\langle N\rangle\ln\left(\frac{\langle N\rangle}{V}\lambda_T^3\right)\text{(熵)} \quad (12)$$

从以上所得的结果看,式(1)是非常合适的。

麦克斯韦-玻尔兹曼统计权重因子 Maxwell-Boltzmann statistical weight factor 见“系综理论对麦克斯韦-玻尔兹曼气体的应用”。

麦克斯韦-玻尔兹曼气体的巨配分函数 grand partition function of Maxwell-Boltzmann gas 见“系综理论对麦克斯韦-玻尔兹曼气体的应用”。

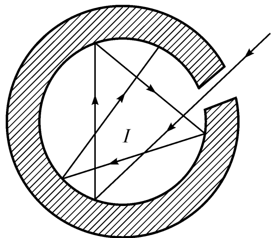
麦-玻分布与对应于单粒子态 j 的巨状态和 $Z_j^{M.B.}$ M-B distribution and grand state sum $Z_j^{M.B.}$ corresponding to single particle state j 见“系综理论对麦克斯韦-玻尔兹曼气体的应用”。

麦克斯韦-玻尔兹曼气体的巨热力势 grand thermodynamic potential of Maxwell-Boltzmann gas 见“系综理论对麦克斯韦-玻尔兹曼气体的应用”。

四、量子统计理论
Quantum Statistical Theory

黑体辐射 black-body radiation 任何只要温度不是绝对零度物体的表面都会以电磁波的形式向外辐射能量,这称为热辐射,而黑体辐射是一种理想物体的热辐射。黑体是指能够全部吸收入射到它上面的任何波长的电磁波,即表面反射系数为零的理想物体,实际上黑体是不存在的,但可用某种装置近似地代替它。如下图所示,在一个恒温的空腔壁上开一小孔,通过小孔射入空腔的所有波长的电磁波经腔内壁多次反射后,几乎全部被吸收,再从小孔射出的电磁波极少。故可把这种空腔近似地看做黑体。经过一定时间,腔内的辐射场与腔壁达到热平衡,平衡辐射性质只依赖于温度,与腔壁的其他性质无关。小孔的辐射性质代表了空腔内的辐射性质。可以证明,黑体单位表面积单位时间发出的总辐射能量 M 与辐射场总能量密度 $u(T)$的关系为

$$M=\frac{1}{4}cu(T)$$



其中 c 是光速,M 又称为辐射通量密度。在统

计物理中，将空腔内的辐射场看做光子气体，可以导出一些与实验完全相符的公式和定律。

热辐射 heat radiation 见“黑体辐射”。

黑体 black-body 见“黑体辐射”。

辐射通量密度 radiation emittance 见“黑体辐射”。

斯特藩-玻尔兹曼定律 Stefan-Boltzmann law 描述黑体辐射场(即光子气体)总能量同热力学温度之间关系的定律。它首先由J.斯特藩于1879年从实验上得到，之后由L.玻尔兹曼于1884年根据热力学理论导出。其数学表达式为

$$M = \sigma T^4 \quad (1)$$

它表明，黑体单位表面单位时间辐射出的所有频率的能量即辐射通量密度 M 与热力学温度 T 的四次方成正比，式中斯特藩-玻尔兹曼常数 σ 应用黑体辐射的普朗克公式可以算出

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15 h^3 c^2} = 5.669\times 10^{-8}\mathrm{W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}} \quad (2)$$

其中 h 是普朗克常数，c 为真空中光速，k_B 为玻尔兹曼常数。该定律常被用来测量物体的表面温度。

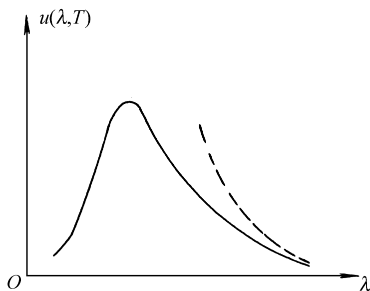
瑞利-金斯公式 Rayleigh-Jeans formula 根据经典统计力学导出的关于空腔辐射的能量密度 $u(\nu, T)$ 按频率 ν 分布公式。T.B.瑞利(1900)和J.H.金斯(1905)将密封空腔中的电磁场分解为一系列单色平面波的叠加，或看做许多振子组成的系统，并利用经典能量均分原理导出R-J公式

$$u(\nu, T)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_B T\mathrm{d}\nu$$

或

$$u(\lambda, T)\mathrm{d}\lambda = 8\pi\frac{k_B T}{\lambda^4}\mathrm{d}\lambda \quad (1)$$

式中 c 是真空中的光速。式(1)是普朗克公式的高温低频的极限情形。从图中看出，R-J公式在长波端与实验结果一致，但在短波端能量密度迅速地单调上升，与实验结果矛盾。实际上，将式(1)对频率从0到∞积分，得到含所有频率的能量密度为无穷大，这意味着平衡辐射场只有当能量密度无穷大时才开始建立。这一荒诞的结果称为“紫外灾难”，它使经典物理陷于严重的危机，从而也推动了辐射理论和近代物理学的发展。



R-J公式(虚线)实验结果(实验)

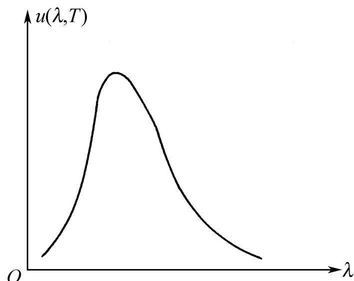
紫外灾难 ultra-violet catastrophe 见“瑞利-金斯公式”。

普朗克公式 Planck formula 黑体辐射场能量密度 $u(\nu, T)$ 按频率 ν 分布公式。M.普朗克1900年获得一个和实验结果一致的纯粹经验公式，1901年提出违背经典物理学的所谓能量量子化的假设：辐射中心是带电的谐振子，它能够同周围的电磁场交换能量，谐振子的能量不连续，是一个量子能量 $h\nu$ 的整数倍：

$$\varepsilon_n = nh\nu \quad (n=1,2,3,\cdots) \quad (1)$$

式中 ν 是振子的频率，$h=6.625\times 10^{-34}\mathrm{J\cdot s}$ 是普朗克常数。根据这个假设可以导出普朗克公式

$$u(\nu, T)\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/k_B T}-1}\mathrm{d}\nu \quad (2)$$



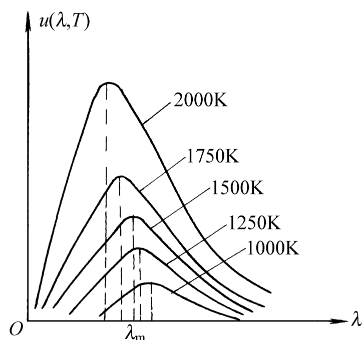
$u(\lambda, T)$-λ 曲线

如图给出辐射场能量密度 $u(\lambda, T)$随波长 λ 变化曲线，它与实验结果完全符合。应用玻色分布容易得到式(2)。式(2)在低频高温 $\frac{h\nu}{k_B T} \ll 1$ 和高频低温 $\frac{h\nu}{k_B T} \gg 1$ 条件下，分别过渡到瑞利-金斯公式和维恩公式。普朗克的黑体辐射理论是物理学的一个重大突破，他首次提出的量子论开创了理论物理学发展的新纪元，成为近代物理学的一个里程碑。

维恩位移定律 Wien displacement law 阐明与黑体辐射场的能量密度 $u(\lambda, T)$极大值相对应的波长，即最概然波长 λ_m 同热力学温度 T 之间关系的定律。将普朗克公式中的 $u(\lambda, T)=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T}-1}$ 对波长 λ 求导使之等于零并让 $\lambda=\lambda_m$，即 $\frac{du(\lambda, T)}{d\lambda}|_{\lambda=\lambda_m}=0$，用数值求解，可以得到

$$\lambda_m T=\frac{hc}{4.965\,k_B}=\text{常数}$$

上式表明，最概然波长与绝对温度成反比，温度升高，λ_m 向短波方向移动，温度愈高，能量愈集中在高频区。如下图所示。光测高温计就是根据上式的原理制成的。位移定律和维恩公式是 W.维恩对黑体辐射理论的发展做出的重要贡献。



几种温度下的黑体辐射谱

维恩公式 Wien formula 黑体辐射场能量密度 $u(\nu, T)$按频率 ν 分布公式，是 W.维恩最初用半唯象方法导出的。可表示为

$$u(\nu, T)d\nu=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}e^{-h\nu/k_B T}d\nu \qquad (1)$$

维恩公式是普朗克公式高频低温的极限情形，式(1)容易由普朗克公式在 $\frac{h\nu}{k_B T} \gg 1$ 条件下得到。

量子理想气体 quantum ideal gas 遵从量子力学规律、近独立全同粒子组成的系统。全同粒子的特点是互换粒子并不导致系统在物理上产生新的状态，这种交换对称性取决于粒子的自旋，凡是自旋量子数为整数(包括零)的全同粒子系，波函数是对称的，这类粒子称为玻色子，例如光子、声子、π 介子等；自旋量子数为半整数的全同粒子系，波函数是反对称的，这类粒子称为费米子，例如电子、质子、中子、中微子、μ 介子等。一般由奇数个费米子组成的复合粒子(或原子)是费米子，如 ^{3}He 原子等；由偶数个费米子或由任何数目玻色子组成的复合粒子(或原子)是玻色子，如氢原子、α 粒子(氦原子核)及 ^{4}He 原子等。对于玻色子，每一个单粒子态上所有的粒子数不受限制，对于费米子，不能有 1 个以上数目的粒子占据相同的单粒子态，即服从泡利不相容原理(Paulis exclusion principle)。玻色子和费米子分别遵从玻色-爱因斯坦统计和费米-狄拉克统计。

玻色子 boson 见“量子理想气体”。

费米子 fermion 见“量子理想气体”。

量子统计 quantum statistics 是理想的量子系统所遵从的一种统计法，它包括玻色(Bose)与爱因斯坦(Einstein)1924 年创立的 B－E 统计法和费米(Fermi)与狄拉克(Dirac)1926 年创立的 F－D 统计法。这两种量子统计法分别适用于波函数是对称的理想玻色系统和波函数是反对称的理想费米系统。无论是哪一种系统，虽然粒子在动力学上是相互独立的，没有粒子相互作用能量，但粒子在统计学上却是“相关的”，即一个粒子的状态影响着其他粒子的状态，表现出多体系统的量子效应。譬如费米子，一个量子态已有一个粒子占据时，它将排斥其他粒子占据同一量子态；而玻色子则不同，占据某个量子态的粒子愈多，就愈促使其

他粒子占据该量子态。量子统计法正体现了这种统计学的相关性。设与第 $i(i=1,2,\cdots)$ 个单粒子能级 ε_i 对应的单粒子态数(简并度)为 g_i,以 N_i 表示占据能级 ε_i 的粒子数。系统的总粒子数和总能量分别为

$$N=\sum_i N_i,\ E=\sum_i N_i\varepsilon_i \qquad (1)$$

对于玻色子,N_i 个全同粒子占据 g_i 个单粒子态可能的方式数应等于从 N_i+g_i-1 个元素中选取 g_i-1 个元素的组合数 $\dfrac{(N_i+g_i-1)!}{N_i!(g_i-1)!}$,故系统在某一宏观分布 $\{N_i\}$ 下的微观状态数,即热力学概率为

$$W^{B.E.}_{\{N_i\}}=\prod_i\frac{(N_i+g_i-1)!}{N_i!(g_i-1)!} \qquad (2)$$

对于费米子,N_i 个全同粒子分布在 g_i 个单粒子态上可能的方式数应是从 g_i 个元素中选取 N_i 个元的组合数 $\dfrac{g_i!}{N_i!(g_i-N_i)!}$,因此,系统的热力学概率为

$$W^{F.D.}_{\{N_i\}}=\prod_i\frac{g_i!}{N_i!(g_i-N_i)!} \qquad (3)$$

根据等概率原理,利用式(1)、(2)和(3)可以求得粒子按能级的最概然分布

$$N_i=\frac{g_i}{e^{(\varepsilon_i-\mu)/k_BT}\pm1} \qquad (4)$$

占据能级为 ε_j 的单粒子态 j 的平均粒子数为

$$\bar{n}_j=\frac{N_j}{g_j}=\frac{1}{e^{(\varepsilon_j-\mu)/k_BT}\pm1} \qquad (5)$$

式(4)、(5)中正号对应于费米–狄拉克分布,负号对应于玻色–爱因斯坦分布。化学势 $\mu=\mu(T,N)$ 可由 $\sum_j\bar{n}_j=N$ 确定,玻色统计中,μ 总是负的,而光子气体的 μ 为零,费米统计中 μ 可正可负。

理想玻色系统的热力学概率 thermodynamical probability of ideal Bose system 见“玻色–爱因斯坦统计和费米–狄拉克统计”。

理想费米系统的热力学概率 thermodynamical probability of ideal Fermi system 见“玻色–爱因斯坦统计和费米–狄拉克统计”。

玻色–爱因斯坦分布 Bose-Einstein distribution 见“玻色–爱因斯坦统计和费米–狄拉克统计”。

费米–狄拉克分布 Fermi-Dirac distribution 见“玻色–爱因斯坦统计和费米–狄拉克统计”。

系综理论对量子理想气体的应用 application of ensemble theory to quantum ideal gas 处理量子系统时,用巨正则系综显得更为方便。系统的总粒子数和总能量分别为

$$N=\sum_j n_j,\ E=\sum_j n_j\varepsilon_j \qquad (1)$$

式中 n_j 是处于能量为 ε_j 的模式(单粒子态)j 的粒子数。利用式(1)可将巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 写做

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_{\{n_j\}}g\{n_j\}z^{\sum_j n_j}e^{-\beta\sum_j n_j\varepsilon_j} \qquad (2)$$

式中 $z\equiv e^{\beta\mu}$ 为易逸度,$\beta=\dfrac{1}{k_BT}$,$\sum_{\{n_j\}}$ 是对 n_j 的各种可能的组合即对系统的各种可能的微观态求和,$g\{n_j\}$ 为引入的统计权重因子,其作用是保证在对系统的微观态求和时每个态只计算一次。对于两种系统,分别有

$$g_{F.D.}\{n_j\}=\begin{cases}1 & n_j=0\text{ 或 }1\\ 0 & \text{其他情况}\end{cases},$$

$$g_{B.E.}\{n_j\}=1,\ n_j=0,1,2,\cdots \qquad (3)$$

若单粒子能级是非简并的,$g\{n_j\}$ 就表示与分布 $\{n_j\}$ 对应的系统微观态数。将式(3)代入式(2),即有

$$\begin{aligned}\mathscr{Z}(T,V,\mu)&=\sum_{\{n_j\}}z^{\sum_j n_j}e^{-\beta\sum_j n_j\varepsilon_j}\\&=\sum_{\{n_j\}}\prod_j(ze^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j}\\&=\prod_j\sum_{n_j}(ze^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j}\\&=\prod_j Z_j\end{aligned} \qquad (4)$$

$$Z_j=\sum_{n_j}(ze^{-\beta\varepsilon_j})^{n_j} \qquad (5)$$

Z_j 称为对应于模式 j 的巨态和,其物理意义是某个模式 j 被 n_j 个粒子占据的相对概率之和。

(1)对于 $F-D$ 统计,$n_j=0,1$,则巨配分函数为

$$\mathscr{Z}^{F.D.}(T,V,z)=\prod_j(1+ze^{-\beta\varepsilon_j})$$

$$=\prod_j Z_j^{F.D.},$$

$$Z_j^{F.D.}=1+ze^{-\beta\varepsilon_j} \quad (6)$$

$Z_j^{F.D.}$ 中的两项分别表示模式 j 上没有这种粒子的相对概率为 1,有 1 个这种粒子的相对概率是 $ze^{-\beta\varepsilon_j}$,于是得到 $n_j^{F.D.}$ 的平均值,即费米–狄拉克分布

$$\overline{n}_j^{F.D.}=\frac{0\cdot 1+1\cdot ze^{-\beta\varepsilon_j}}{1+ze^{-\beta\varepsilon_j}}=\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} \quad (7)$$

(2)对于 $B-E$ 统计,$n_j=0,1,2,\cdots$,则巨配分函数为

$$\mathscr{Z}^{B.E.}(T,V,z)$$

$$=\prod_j(1+ze^{-\beta\varepsilon_j}+z^2e^{-2\beta\varepsilon_j}+\cdots)$$

$$=\prod_j\frac{1}{1-ze^{-\beta\varepsilon_j}}$$

$$=\prod_j Z_j^{B.E.},$$

$$Z_j^{B.E.}=\frac{1}{1-ze^{-\beta\varepsilon_j}} \quad (8)$$

容易得到 $n_j^{B.E.}$ 的平均值,即玻色–爱因斯坦分布

$$\overline{n}_j^{B.E.}=\sum_{n_j}n_jz^{n_j}e^{-\beta n_j\varepsilon_j}\Big/\sum_{n_j}z^{n_j}e^{-\beta n_j\varepsilon_j}$$

$$=\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}-1} \quad (9)$$

以上式中 z 或 μ 由总粒子数的条件式(1)确定。

玻色–爱因斯坦统计权重因子 Bose-Einstein statistical weight factor 见“系综理论对量子理想气体的应用”。

费米–狄拉克统计权重因子 Fermi-Dirac statistical weight factor 见“系综理论对量子理想气体的应用”。

理想费米系统的巨配分函数及与单粒子态 j 对应的巨状态和 $Z_j^{F.D.}$ grand partition function and grand state sum $Z_j^{F.D.}$ corresponding to single partical state j for ideal Fermi system 见“系综理论对量子理想气体的应用”。

理想玻色系统的巨配分函数及与单粒子态 j 对应的巨状态和 $Z_j^{B.E.}$ grand partition function and grand state sum $Z_j^{B.E.}$ corresponding to single partical state j for ideal Bose system 见“系综理论对量子理想气体的应用”。

量子理想气体的热力学量公式 thermodynamic quantities formula of quantum ideal gas 用巨配分函数表示式求出各热力学量的公式。量子理想气体的巨配分函数为

$$\mathscr{Z}(T,V,z)=\prod_j(1\pm ze^{-\beta\varepsilon_j})^{\pm1}$$

(“+”: $F-D$ 系统,“−”: $B-E$ 系统) (1)

其中 $z\equiv e^{\beta\mu}$ 为易逸度,$\beta=\frac{1}{k_BT}$,$\prod_j$ 是对单粒子态求积,由式(1)可写出巨热力势 J、压强 p、,内能 U、平均粒子数 $\langle N\rangle$ 等热力学量的表达式

$$J(T,V,\mu)=-k_BT\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)$$

$$=\mp k_BT\sum_j\ln(1\pm e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT}) \quad (2)$$

$$\frac{pV}{k_BT}=\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\pm\sum_j\ln(1\pm e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT}) \quad (3)$$

$$U=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_j\frac{\varepsilon_j}{e^{(\varepsilon_j-\mu)/k_BT}\pm1} \quad (4)$$

$$\langle N\rangle=\frac{\partial}{\partial\mu}[\beta^{-1}\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)]$$

$$=\sum_j\frac{1}{e^{(\varepsilon_j-\mu)/k_BT}\pm1} \quad (5)$$

各式上面的符号对应 $F-D$ 系统,下面的符号对应 $B-E$ 系统。

非相对论性量子理想气体的物态方程 state equation of nonrelativistic quantum ideal gas 压强 p 和体积 V 的乘积与内能 U 的关系式。巨配分函数的对数的表示式可以写做

$$\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_j\pm\ln(1\pm e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT}) \quad (1)$$

(“+”: $F-D$ 系统,“−”: $B-E$ 系统)

当系统的体积 $V\to\infty$ 时,式(1)中对单粒子态 j 求和可代以积分即 $\sum_j\to\frac{\omega_s}{h^3}\iint d\boldsymbol{p}d\boldsymbol{r}=\frac{V\omega_s}{(2\pi)^3}\int dk4\pi k^2$,这里 ω_s 是自旋简并度,k 是波

矢的大小。则物态方程和内能分别为

$$\frac{pV}{k_BT}=\ln\mathscr{Z}=\pm\frac{\omega_s V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}k4\pi k^2(1\pm e^{(\mu-\varepsilon)/k_BT}) \tag{2}$$

$$U=\sum_j \pi_j\varepsilon_j=\frac{\omega_s V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}k4\pi k^2 n_\varepsilon\varepsilon$$

$$\left(n_\varepsilon=\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}\pm1}=\pi_j, \begin{array}{l}\text{“+”: } F-D \text{ 分布}\\ \text{“−”: } B-E \text{ 分布}\end{array}\right) \tag{3}$$

由粒子能量的相对论公式 $\varepsilon=\sqrt{m^2c^2+p^2}c-mc^2$ 得到

$$\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}(\text{非相对论性}),$$

$$\varepsilon=\hbar kc(\text{相对论性})\quad\left(\hbar=\frac{h}{2\pi}\right) \tag{4}$$

可得适用于任何量子理想气体的物态方程

$$pV=\frac{2}{3}U\quad(\text{非相对论性情形}) \tag{5}$$

$$pV=\frac{1}{3}U\quad(\text{相对论性情形}) \tag{6}$$

相对论性量子理想气体的物态方程 stale equation of relativistic quantum ideal gas 见“非相对论性量子理想气体的物态方程”。

非相对论性量子理想气体的绝热方程 adiabatic equation of nonrelativistic quantum ideal gas 描述量子理想气体在可逆绝热变化过程中,宏观参量之间关系的方程。当系统的体积 $V\to\infty$ 时,巨配分函数的对数 $\ln\mathscr{Z}$ 可表示为

$$\begin{aligned}&\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)\\&=\sum_j \pm\ln(1\pm e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT})\\&=\pm\frac{\omega_s V}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}k4\pi k^2\ln(1\pm e^{(\mu-\varepsilon)/k_BT})\end{aligned} \tag{1}$$

式中 ω_s 是自旋简并度,k 为波矢的大小,“+”和“−”号分别对应 $F-D$ 和 $B-E$ 系统。对于非相对论性情形,单粒子能量 $\varepsilon=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$,式(1)以及巨热力势 J 可写成

$$\ln\mathscr{Z}=\pm\frac{\omega_s V}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\cdot\int_0^\infty \mathrm{d}y\sqrt{y}(k_BT)^{3/2}\ln(1\pm e^{\mu/k_BT}e^{-y})\quad(y=\beta\varepsilon) \tag{2}$$

$$\begin{aligned}J(T,V,\mu)&=-pV=-k_BT\ln\mathscr{Z}(T,V,\mu)\\&=-VT^{5/2}f\left(\frac{\mu}{T}\right)\end{aligned} \tag{3}$$

式(3)中 f 是 $\frac{\mu}{T}$ 的函数,它不含 V。熵 S、粒子数 $\langle N\rangle$ 为

$$\begin{aligned}S&=-\left(\frac{\partial J}{\partial T}\right)_{V,\mu}=VT^{3/2}f_S\left(\frac{\mu}{T}\right),\\ \langle N\rangle&=-\left(\frac{\partial J}{\partial\mu}\right)_{T,V}=VT^{5/2}f'\left(\frac{\mu}{T}\right)\\&=VT^{3/2}f_N\left(\frac{\mu}{T}\right)\end{aligned} \tag{4}$$

显然,f_S,f_V 都不含 V,它们仅是 $\left(\frac{\mu}{T}\right)$ 的函数,因此 $\frac{S}{N}=g\left(\frac{\mu}{T}\right)$ 应与 V 无关。若在定熵(可逆绝热)条件下,使 V 变化,则 $\frac{\mu}{T}$ 应保持一定,于是得到下述绝热方程

$$\begin{aligned}&VT^{3/2}=\text{常数},\ pT^{-5/2}=\text{常数},\\&pV^{5/3}=\text{常数}\end{aligned} \tag{5}$$

对于相对论性情形,$\varepsilon=\hbar kc$,则有

$$\ln\mathscr{Z}=\pm\frac{\omega_s V}{2\pi^2}\left(\frac{k_BT}{c\hbar}\right)^3\cdot\int_0^\infty \mathrm{d}y y^2\ln(1\pm e^{\mu/k_BT}e^{-y}) \tag{6}$$

$$\begin{aligned}J(T,V,\mu)&=-VT^4f\left(\frac{\mu}{T}\right),\\S&=VT^3f_S\left(\frac{\mu}{T}\right),\\ \langle N\rangle&=VT^3f_N\left(\frac{\mu}{T}\right)\end{aligned} \tag{7}$$

在定熵条件下,绝热方程为

$$\begin{aligned}&VT^3=\text{常数},\ pT^{-4}=\text{常数},\\&pV^{4/3}=\text{常数}\end{aligned} \tag{8}$$

式(5)与经典泊松绝热方程 $pV^\gamma=$常数($\gamma=C_p/C_V$)相似,但简并量子气体比热容的比值不是 $\frac{5}{3}$,同时式(5)中的幂指数也与比热容比值无关。因为 $C_p/C_V=\frac{5}{3}$ 及 $C_p-C_V=R$ 不再成立。

相对论性量子理想气体的绝热方程 adiabatic equation of relativistic quantum ideal gas 见“非相对论性量子理想气体的绝热方程”。

高温和/或低密度量子理想气体的热力学量展开式 thermodynamic quantities expansion of quantum ideal gas at high temperature and/or low density 在高温和/或低密度条件下，量子理想气体的热力学量按易逸度 $z\equiv e^{\mu/k_BT}$（μ：化学势）的幂次展开的公式。它用来研究系统在此条件下的性质。可将热波长 λ_T 近似地表示为

$$\lambda_T\equiv\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}\approx\left(\frac{\hbar^2}{mk_BT}\right)^{1/2}$$

或
$$\frac{\hbar^2}{m\lambda_T^2}\approx k_BT\quad\left(\hbar\equiv\frac{h}{2\pi}\right)\tag{1}$$

式(1)中第2式左端相当于粒子动能，热波长的名字由此而来，它是一个描述粒子波函数在空间扩展程度的量。以 $d=\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$ 表示粒子平均间距，当 $\lambda_T\ll d$ 即高温和/或低密度情形，则有 $n\lambda_T^3=\frac{\langle N\rangle}{V}\lambda_T^3=e^{\mu/k_BT}\ll1$，或 $z\ll1$，此时，可以把量子统计分布 $n_\varepsilon=\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}\pm1}=\frac{ze^{-\varepsilon/k_BT}}{1\pm ze^{-\varepsilon/k_BT}}$ 展成 $ze^{-\varepsilon/k_BT}$ 的幂级数。并将对单粒子态 j 求和代以积分：$\sum_j\rightarrow\frac{V\omega_s}{h^3}\int d\boldsymbol{p}=\frac{V\omega_s}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}$（$\omega_s$：自旋简并度，$\boldsymbol{k}$：波矢）。计算得出总粒子数 N、内能 U 和物态方程的展开式

$$N=\sum_j\pi_j=\frac{\omega_sV}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}n_\varepsilon=\frac{\omega_sV}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}(\mp1)^{l+1}z^l/l^{3/2}\tag{2}$$

$$U=\sum_j\pi_j\varepsilon_j=\frac{\omega_sV}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}\varepsilon n_\varepsilon=\frac{3}{2}\omega_sVk_BT\frac{1}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}(\mp1)^{l+1}z^l/l^{5/2}\tag{3}$$

$$p=\frac{2}{3}\frac{U}{V}=k_BTn\left(1\pm\frac{1}{2^{5/2}}\frac{n\lambda_T^3}{\omega_s}+\cdots\right)\tag{4}$$

以上式中，上面的符号对应 $F-D$ 系统，下面的符号对应 $B-E$ 系统。当 $n\rightarrow0$ 或 $k_BT\gg1$ 时，式(4)变为经典理想气体物态方程，这表明当气体非常稀薄或温度足够高时，理想玻色系统和理想费米系统之间的差别消失了，并趋于经典理想气体。若气体的 n、T 固定，则玻色气体的压强 $p<nk_BT$，费米气体的压强 $p>nk_BT$，显示出量子效应，它相当于粒子之间存在着吸引势或排斥势。式(4)右端第2项一般都不大，例如氦在1个大气压，$T=4.7$K（设 $\omega_s=1$）时，$n\lambda_T^3=0.13$。然而，金属内的电子气由于 m 非常小，而 n 很大，即使在常温下，量子力学效应也很显著，上述展开式不能使用。

热波长 thermal wavelength 见“高温和/或低密度量子理想气体的热力学量展开式”。

量子统计分布与麦克斯韦-玻尔兹曼分布的关系 relationship between quantum statistical distribution and Maxwell-Boltzmann distribution 麦-玻分布是量子统计分布在高温或低密度下的极限情形。当

$$\pi_j\ll1\quad 或\quad e^{(\varepsilon_j-\mu)/k_BT}\gg1\tag{1}$$

时，两种量子统计分布 $\pi_j=\frac{1}{e^{(\varepsilon_j-\mu)/k_BT}\pm1}$ 均过渡到麦-玻分布 $\pi_j=e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT}$，要使式(1)对包括 $\varepsilon_j=0$ 的所有单粒子态都能满足，必须有 $e^{\mu/k_BT}\ll1$。粒子数密度 n 与温度 T 和化学势 μ 的关系为：$n=\frac{\sum_j\pi_j}{V}=\frac{e^{\mu/k_BT}}{h^3}\int_0^{\infty}dp4\pi p^2=\frac{e^{\mu/k_BT}}{\lambda_T^3}$，其中 $\lambda_T\equiv\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$ 为热波长。因此，$M-B$ 分布的适用条件是

$$n\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{3/2}\equiv n\lambda_T^3\ll1\tag{2}$$

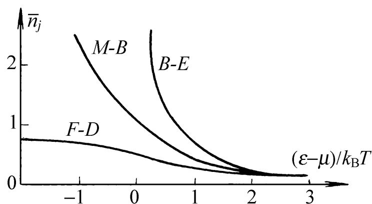
当描述粒子波函数在空间扩展程度的热波长 λ_T 比粒子间平均距离 $d=n^{-1/3}$ 小得多即满足式(2)时，由于气体非常稀薄，粒子大小比 d 小得多，故量子效应可以忽略，两种量子气体差别消失，统计法也变得不重要了。定义简并温度（退化温度）

$$T^*=\left(\frac{h^2}{2\pi mk_B}\right)n^{2/3}\tag{3}$$

条件式(2)可改写为

$$T\gg T^*\tag{4}$$

若系统所处的温度 T 比 T^* 高得多,则 $M-B$ 分布适用,反之,必须应用 $B-E$ 分布或 $F-D$ 分布,此时的系统称为简并性气体。质量愈大或密度愈低的气体,T^* 愈小,条件式(4)愈容易满足,例如氩气,在通常温度下,$M-B$ 分布总是适用的,但电子气则不同,$m_e=9.1\times10^{-31}$kg, $n=6\times10^{28}\text{m}^{-3}$, $T^*\approx10^3\sim10^4$K,故遵从 $F-D$ 分布。下图上三条曲线分别表示 $F-D$, $B-E$ 和 $M-B$ 三种分布,在 $\bar{n}_j\ll$ 曲线部分,三种分布趋于一致。



三种分布

退化温度 degenerate temperature 见“量子统计分布与麦克斯韦-玻尔兹曼分布的关系”。

简并性气体 degenerate gas 见“量子统计分布与麦克斯韦-玻尔兹曼分布的关系”。

气体的比热容 specific heat capacity of gas

讨论满足条件 $e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}\gg1$ 的气体,它们遵从麦-玻分布,配分函数可表示为

$$Z=\sum_i g_i e^{-\varepsilon_i/k_BT} \tag{1}$$

设分子的各个自由度的运动是相互独立的,一个分子的能量 ε_i 可写做

$$\varepsilon_i=\varepsilon^t+\varepsilon^r+\varepsilon^v \tag{2}$$

其中 ε^t、ε^r 和 ε^v 分别代表平动、转动和振动自由度的能量:

$$\varepsilon^t=\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$$

$$\varepsilon^r=\frac{l(l+1)}{8\pi^2 I}h^2,\ l=0,1,2,\cdots,$$

$$\varepsilon^v=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu,\ n=0,1,2,\cdots \tag{3}$$

式中 I 是等效转子的转动惯量,l 是转动量子数,n 是振动量子数。简并度 g_i 应是各个自由度的简并度之积

$$g_i=g^t\cdot g^r\cdot g^v\quad(g^r=2l+1,\ g^v=1) \tag{4}$$

将式(2)和(4)代入式(1),则有

$$Z=Z^t\cdot Z^r\cdot Z^v \tag{5}$$

$$Z^t=\frac{V}{h^3}(2\pi mk_BT)^{3/2},$$

$$Z^r=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{-\varepsilon^r/k_BT},$$

$$Z^v=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\varepsilon^v/k_BT} \tag{6}$$

根据内能公式 $U=Nk_BT^2\left(\frac{\partial\ln Z}{\partial T}\right)_V$,即可求得系统的定体比热容

$$C_V=\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V=C_V^t+C_V^r+C_V^v,$$

$$C_V^{\xi}=RT\frac{\partial^2}{\partial T^2}(T\ln Z^{\xi}) \tag{7}$$

其中右上标 ξ 代表平动或转动或振动自由度。式(7)表明,定体比热容是各个自由度定体比热容之和。

分子平动的比热容 specific heat capacity of molecular translational motion 气体分子的平动容易被激发。利用公式

$$C_V^t=\left(\frac{\partial U^t}{\partial t}\right)_V=RT\frac{\partial^2}{\partial T^2}(T\ln Z^t) \tag{1}$$

和 $Z^t=\frac{V}{h^3}(2\pi mk_BT)^{3/2}$,可求出

$$C_V^t=\frac{3}{2}N_Ak_B=\frac{3}{2}R \tag{2}$$

实际上,利用能量均分原理即可得到。对于常温常压下的单原子理想气体,此结果与实验符合得很好。

分子振动的比热容 specific heat capacity of molecular vibration 双原子的相对振动与一个质量为 μ、坐标为 r 的一维谐振子等价,分子振动自由度是1,如图1所示。振动能级 ε^v 和简并度 g^v 可表示为

$$\varepsilon^v=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu,\ n=0,1,2,\cdots,$$

$$g^v=1 \tag{1}$$

将式(1)代入振动配分函数 Z^v 公式则有

$$Z^v=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{h\nu}{k_BT}\right]$$

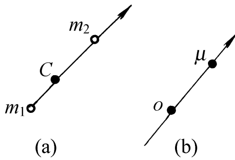


图 1　双原子分子振动自由度(a)及等效振子(b)

$$= \frac{e^{-h\nu/2k_BT}}{1-e^{-h\nu/k_BT}} \qquad (2)$$

即可求出分子的平均振动能量 $\bar{\varepsilon}^v$ 和分子振动的比热容 C_V^v

$$\bar{\varepsilon}^v = \frac{\langle E^v\rangle}{N} = k_BT^2\frac{\partial \ln Z^v}{\partial T}$$

$$= \frac{h\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1} + \frac{1}{2}h\nu \qquad (3)$$

$$C_V^v = RT\frac{\partial^2}{\partial T^2}(T\ln Z^v)$$

$$= R\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right)^2\frac{e^{h\nu/k_BT}}{(e^{h\nu/k_BT}-1)^2} \qquad (4)$$

引入振动特征温度

$$T_0^v = h\nu/k_B \qquad (5)$$

当 $T \gg T_0^v$, $\exp\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right) \approx 1+\frac{h\nu}{k_BT} = 1+T_0^v/T$,于是有

$$\bar{\varepsilon}^v = k_BT,\ C_V^v = N_Ak_B = R \qquad (6)$$

这些结果与采用经典谐振子能量公式并在相空间积分所得的结果完全相同。当 $T \ll T_0^v$ 时,可得

$$\bar{\varepsilon}^v = \frac{1}{2}h\nu + h\nu e^{-h\nu/k_BT} \qquad (7)$$

$$C_V^v = N_Ak_B\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right)^2 e^{-h\nu/k_BT}$$

$$= R\left(\frac{T_0^v}{T}\right)^2 e^{-T_0^v/T} \qquad (8)$$

式(7)、(8)的曲线示于图 2 上,表明在低温下,振动比热容随 T 下降按指数规律趋于零,这是因为热运动能量 k_BT 比能级间距小得多,不足以激发振动的跃迁,它不吸收热量,对比热容没有贡献。必须指出,这里所说的低温是相对而言的,由于常见的双原子分子的 T_0^v 为 10^3K 量级,故在常温下也满足 $T \ll T_0^v$。

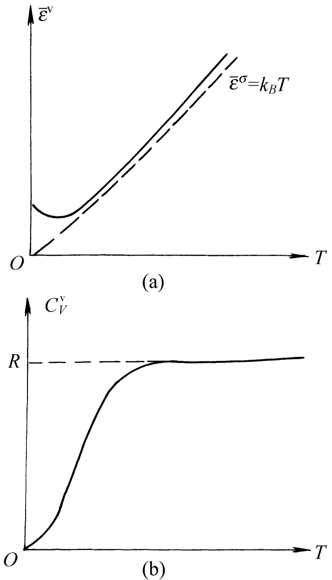


图 2　双原子分子振动的平均能量与(a)与振动比热容(b)曲线

对于原子数超过两个的多原子分子,除 3 个平动和一般 3 个转动自由度外,还有 $3s-6$ 个属于原子间相对振动的自由度,s 表示每个分子中的原子数,内部的相对振动属于整体的振动模式,相互独立振动模式的数目与振动自由度数一样,每种振动模式有自己的频率,能量是量子化的。振动配分函数为

$$Z^v = \prod_i \frac{\exp(-h\nu_i/2k_BT)}{1-\exp(-h\nu_i/k_BT)} \qquad (9)$$

分子的平均振动能量 $\bar{\varepsilon}^v$ 和分子振动的比热容 C_V^v 为

$$\bar{\varepsilon}^v = k_BT^2\frac{\partial \ln Z^v}{\partial T}$$

$$= \sum_i\left[\frac{h\nu_i}{e^{h\nu_i/k_BT}-1}+\frac{1}{2}h\nu_i\right] \qquad (10)$$

$$C_V^v = R\sum_i\left\{\left(\frac{h\nu_i}{k_BT}\right)^2\right.$$

$$\times \frac{\exp(h\nu_i/k_BT)}{[1-\exp(h\nu_i/k_BT)]^2}\Bigg\} \quad (11)$$

式中 $\sum_i$ 是对各种振动模式求和，振动频率由分子光谱测定，例如 CO_2，它是线性分子，有 4 个振动自由度，4 个独立的振动模式的频率分别为 $\nu_1=\nu_2=2010\times10^{10}$Hz，$\nu_3=3900\times10^{10}$Hz，$\nu_4=7050\times10^{10}$Hz，而非线性分子 SO_2 有 3 个振动自由度，振动频率分别是 $\nu_1=1575\times10^{10}$Hz，$\nu_2=3456\times10^{10}$Hz 和 $\nu_3=4083\times10^{10}$Hz。式(4)和(11)与实验结果一致。

双原子分子的振动特征温度 vibrational characteristic temperature of diatomic molecule 见“分子振动的比热容”。

多原子分子振动的比热容 specific heat capacity of polyatomic molecular vibration 见“分子振动的比热容”。

分子转动的比热容 specific heat capacity of molecular rotation 对于异核双原子分子(两个不同原子组成的分子)的转动，可用一转动惯量为 I 的等效转子来表示，等效转子是质量为 $\mu=\dfrac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ 的质点以等效长度 r_0 为距离绕质心 C 的转动(见图 1)。

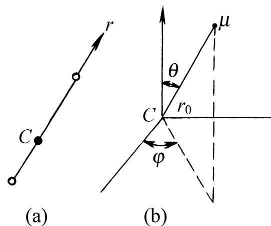


图 1　双原子分子(a)及其等效转子(b)

转动能级 ε^r 和简并度 g^r 可表示为

$$\varepsilon^r=l(l+1)\frac{h^2}{8\pi^2I} \quad l=1,2,\cdots,$$

$$g^r=2l+1 \quad (1)$$

定义转动特征温度

$$T_0^r=\frac{h^2}{8\pi^2Ik_B} \quad (2)$$

在 $T\gg T_0^r$ 高温下，量子效应不起作用，此时转动配分函数公式可用积分代替求和：

$$Z^r=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\exp\left[-l(l+1)\frac{T_0^r}{T}\right]$$

$$=\int_0^\infty \mathrm{d}\,l(l+1)\mathrm{e}^{-l(l+1)T_0^r/T}=\frac{T}{T_0^r} \quad (3)$$

实际上，T_0^r 的量级为 10K，故 $T\gg T_0^r$ 常温下即能满足。于是

$$\bar{\varepsilon}^r=k_BT^2\frac{\partial\ln Z^r}{\partial T}=k_BT,$$

$$C_V^r=N_Ak_BT\frac{\partial^2}{\partial T^2}(T\ln Z^r)=R \quad (4)$$

在 $T\ll T_0^r$ 的低温下，保留式(3)求和中的前两项：$\ln Z^r=\ln(1+3\mathrm{e}^{-2T_0^r/T})\approx3\mathrm{e}^{-2T_0^r/T}$，故可得到

$$\bar{\varepsilon}^r\approx6k_BT_0^r\mathrm{e}^{-2T_0^r/T},$$

$$C_V^r\approx12R\left(\frac{T_0^r}{T}\right)^2\mathrm{e}^{-2T_0^r/T} \quad (5)$$

可见双原子分子平均转动能和转动的比热容随 T 减小趋于零。如图 2 所示。若 T 处于中

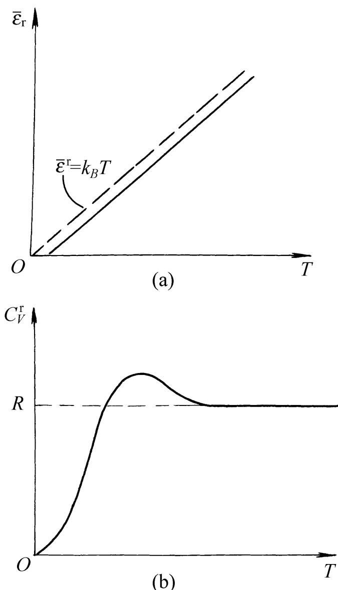


图 2　异核双原子分子平均转动能(a)和转动的比热容(b)曲线($T\ll T_0^r$)

间温区，需要将式(3)求和中保留若干项才能确保精度。计算结果为

$$C^r_V = R\left[1+\frac{1}{45}\left(\frac{T^r_0}{T}\right)^2+\frac{16}{945}\left(\frac{T^r_0}{T}\right)^3+\cdots\right] \quad (6)$$

式(6)曲线示于图3。对于同核双原子分子(两个相同原子构成的分子)气体，必须考虑分子对称性的影响。当温度不很低时，$\bar{\varepsilon}^r$ 和 C^r_V

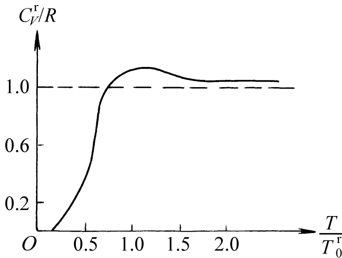


图3　异核双原子气体的转动比热容曲线(中间温区)

的计算结果仍与异核分子一样，然而，当温度相当低时，根据量子统计，必须考虑两原子互换下波函数对称与反对称的要求。例如氢分子，它是费米子(氢核)组成的同核双原子分子，其总波函数是反对称的。因此，对于正氢分子，两氢核自旋平行，转动量子数 l 只能取奇数值，而对于两核自旋反平行的仲氢分子，l 只能取偶数值。在 T＜100k 条件下，正氢和仲氢的含量分别占 3/4 和 1/4，故氢气的转动比热容为

$$C^r_V=\frac{3}{4}C^{ro}_V+\frac{1}{4}C^{rp}_V \quad (7)$$

式中 C^{ro}_V和 C^{rp}_V分别为正氢和仲氢的转动比热容。又如氘分子 D_2，它是由玻色子组成的同核双原子分子，正氘取 l 为偶数，仲氘则取 l 为奇数，在特定条件下，正氘占 2/3，仲氘占 1/3，其比热容也可同样得到。上述结果与实验相符，这表明核自旋对气体的热性质确有影响。

多原子分子的转动惯量 I 相当大，因此，即使温度很低，条件 $T \gg T^r_0$ 仍可满足，故转动比热容是 $C^r_V=\frac{3}{2}N_Ak_B=\frac{3}{2}R$。值得注意的是多原子分子转动也像同核双原子分子那样出现不可分辨的空间位形，引入对称因子 γ 表示存在的不可分辨的位形数。例如异核双原子分子的 $\gamma=1$，轴对称的线性分子(CO_2 等)$\gamma=2$，棱锥形分子(NH_3 等)$\gamma=3$。在求转动配分函数时应除以 γ 以避免因位形相同导致重复积分，这不会改变气体的内能和比热容的值，但却会影响自由能、熵等。

双原子分子的转动特征温度　rotational characteristic temperature of diatomic molecule　见“分子转动的比热容”。

异核双原子分子转动的比热容　specific heat capacity of heteronuclear diatomic molecular rotation　见“分子转动的比热容”。

同核双原子分子转动的比热容　specific heat capacity of homonuclear diatomic molecular rotation　见“分子转动的比热容”。

多原子分子转动的比热容　specific heat capacity of polyatomic molecular rotation　见“分子转动的比热容”。

爱因斯坦固体比热容理论　Einstein theory of solid specific heat capacity　1907 年爱因斯坦首先提出量子论，计算了固体比热容。他假设固体中每个原子在其平衡位置附近作微振动，这种振动是属于集体的振动模式。N 个原子组成的固体可看做 $3N$ 个独立的频率相同的简谐振子的集合。$\int g(\nu)\mathrm{d}\nu = 3N$ 中的频谱 $g(\nu)=C\delta(\nu-\nu_E)$，$C=3N$。振子的能量可表示为

$$\varepsilon_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu,\ n=0,1,2,\cdots \quad (1)$$

简谐振子应该遵从玻尔兹曼分布，配分函数为

$$Z=\sum_n g_n e^{-\beta\varepsilon_n}=\sum_{n=0}^{\infty}e^{-\left(n+\frac{1}{2}\right)h\nu/k_BT}=\frac{e^{-\frac{h\nu}{2k_BT}}}{1-e^{-h\nu/k_BT}} \quad (2)$$

简谐振子的平均能量 $\bar{\varepsilon}$ 和固体的内能 U 分别为

$$\bar{\varepsilon}=k_BT^2\frac{\partial \ln Z}{\partial T}=\frac{h\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1}+\frac{1}{2}h\nu \quad (3)$$

$$U=3N\bar{\varepsilon}=\frac{3Nh\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1}+E_0 \qquad (4)$$

式中 $E_0=\frac{3}{2}Nh\nu$ 是 $T=0\,K$ 时的内能，即所谓零点能。比热容为

$$C_V=\frac{\partial U}{\partial T}=3N_Ak_B\left(\frac{h\nu}{k_BT}\right)^2\frac{e^{h\nu/k_BT}}{(e^{h\nu/k_BT}-1)^2}$$

$$=3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2\frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T}-1)^2} \qquad (5)$$

这就是爱因斯坦比热容公式，其中 θ_E 是爱因斯坦特征温度，定义为

$$\theta_E=\frac{h\nu}{k_B} \qquad (6)$$

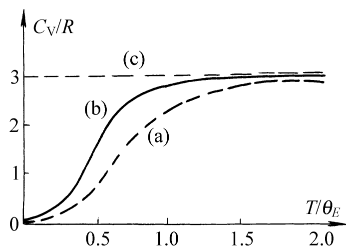
在 $T\gg\theta_E$ 高温极限下，式(5)给出 $C_V=3R$，这正是杜隆-珀蒂定律，与实验结果一致。在 $T\ll\theta_E$ 低温极限下，则有

$$C_V\approx 3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{-\theta_E/T} \qquad (7)$$

表明 C_V 是按指数规律而不是随温度的三次方趋于零，与实验不符，原因在于爱因斯坦模型关于振子的频率都相同的假设过于简单。

爱因斯坦特征温度 Einstein characteristic temperature 见“爱因斯坦固体比热容理论”。

爱因斯坦固体比热容公式 Einstein formula of solid specific heat capacity 见“爱因斯坦固体比热容理论”。



爱因斯坦固体比热容曲线

(a)爱因斯坦曲线；(b) Ag、Al、C 等固体的实验曲线；(c)经典比热容曲线

德拜固体比热容理论 Debye theory of solid specific heat capacity 1912 年德拜应用连续介质理论提出如下模型：声波振动在作为各向同性介质的固体中传播有纵波和横波两种，速度分别是 C_l 和 C_t，即一个频率与三种振动模式：一个纵向振动和两个横向振动对应。若将弹性声波波场看做能量为 $\varepsilon=h\nu=cp$、动量(准动量)为 $\boldsymbol{p}=h\boldsymbol{k}$ 的声子系统，而且是一独立粒子系，则能量在 $\varepsilon\sim\varepsilon+d\varepsilon$ 内的状态数为 $g(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{4\pi V}{h^3}p^2dp=\frac{4\pi V}{h^3}\frac{\varepsilon^2}{c^3}d\varepsilon$，故在频率间隔 $\nu\sim\nu+d\nu$ 内总的振动模式数可以表示为

$$g(\nu)d\nu=4\pi V\left(\frac{2}{c_t^3}+\frac{1}{c_l^3}\right)\nu^2d\nu \qquad (1)$$

其中固体的频率分布函数

$$g(\nu)=4\pi V\left(\frac{2}{c_t^3}+\frac{1}{c_l^3}\right)\nu^2 \qquad (2)$$

称为德拜频谱，曲线示于图 1 上。由积分 $\int_0^{\nu_m}g(\nu)d\nu=3N$，得到

$$\nu_m=\left[9N\Big/4\pi V\left(\frac{2}{c_t^3}+\frac{1}{c_l^3}\right)\right]^{1/3} \qquad (3)$$

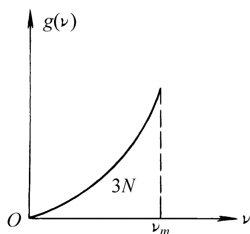


图 1

ν_m 是最大频率。定义德拜特征温度

$$\Theta_D=\frac{h\nu_m}{k_B} \qquad (4)$$

已知每个振动模式的平均能量的表示式是 $\bar{\varepsilon}=\frac{h\nu}{e^{h\nu/k_BT}-1}+\frac{1}{2}h\nu$，于是得到 1 摩尔固体的内能和比热容分别为

$$U=\int_0^{\nu_m}\bar{\varepsilon}g(\nu)d\nu$$

$$=\frac{9N_A}{\nu_m^3}\int_0^{\nu_m}\frac{h\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1}d\nu+\frac{9}{8}N_Ah\nu_m \qquad (5)$$

$$C_V=\frac{\partial U}{\partial T}$$

$$=9N_Ak_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3\int_0^{\Theta_D/T}\frac{e^xx^4dx}{(e^x-1)^2}$$

$$\left(x=\frac{h\nu}{k_BT}\right) \tag{6}$$

当 $T\gg\Theta_D$ 时，则有 $C_V\approx 3R$，即杜隆-珀蒂定律，与实验一致。当 $T\ll\Theta_D$ 时，式(6)的积分上限可取为∞，因此得出

$$C_V=\frac{12}{5}R\pi^4\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \tag{7}$$

式(7)表明，在低温下，$C_V\propto T^3$，称为德拜定律，它与非金属固体在低温下的实验结果符合。对于中间温区，用数值计算求式(6)积分而得到 C_V，如图2所示。应该指出，式(2)也只是一种近似，实际的固体其晶体结构具有一定的对称性，呈各向异性，应用晶格动力学得到的频谱比式(2)复杂得多。

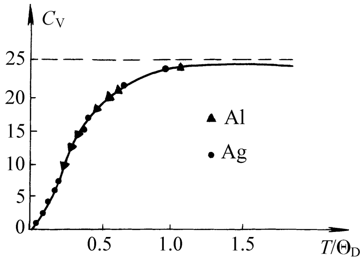


图2　德拜比热容曲线

德拜频谱　Debye frequency spectrum　见“德拜固体比热容理论”。

德拜特征温度　Debye characteristic temperature　见“德拜固体比热容理论”。

德拜固体比热容公式　Debye formula of solid specific heat capacity　见“德拜固体比热容理论”。

米-格林艾森方程　Mie-Grüneisen equation　固体的物态方程。固体的内能 U 由两部分组成，一部分是 N 个原子的相互作用能即结合能 $-N\varepsilon_0$，$\varepsilon_0=\varepsilon_0(V)$ 为一个原子的平均结合能；另一部分是 N 个原子在格点附近振动的能量 U^v，它与温度有关。系统的自由能 F 与 U 相似。故可写做

$$U=-N\varepsilon_0(V)+U^v(T,V),$$

$$U^v=\sum_{i=1}^{3N}\left\{\frac{h\nu_i}{e^{h\nu_i/k_BT}-1}+\frac{1}{2}h\nu_i\right\} \tag{1}$$

$$F=U-TS$$
$$=-N\varepsilon_0(V)+F^v(T,V),$$
$$F^v=-k_BT\ln\prod_i Z_i^v$$
$$=\sum_{i=1}^{3N}\left\{\frac{1}{2}h\nu_i+k_BT\ln(1-e^{-h\nu_i/k_BT})\right\} \tag{2}$$

其中 $Z_i^v=e^{-h\nu_i/2k_BT}/(1-e^{-h\nu_i/k_BT})$ 是与频率为 ν_i 的振动模式对应的振动配分函数，ν_i 与晶格常数因而和体积 V 有关。利用公式 $p=-\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$ 及式(2)，可将压强 p 表示为

$$p=p(0,V)-p_1(T,V),$$

$$p(0,V)=N\frac{d\varepsilon_0}{dV}+\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{3N}\left(-\frac{\partial\ln\nu_i}{\partial\ln V}\right)\frac{h\nu_i}{2},$$

$$p_1(T,V)=\frac{1}{V}\sum_{i=1}^{3N}\left[\left(-\frac{\partial\ln\nu_i}{\partial\ln V}\right)\times\frac{h\nu_i}{e^{h\nu_i/k_BT}-1}\right] \tag{3}$$

也可将式(1)改写为与式(3)类似的形式

$$U(T,V)=U(0,V)+U_1(T,V),$$

$$U(0,V)=-N\varepsilon_0(V)+\sum_{i=1}^{3N}\frac{h\nu_i}{2},$$

$$U_1(T,V)=\sum_{i=1}^{3N}\frac{h\nu_i}{e^{h\nu_i/k_BT}-1} \tag{4}$$

式(3)和(4)中 $U(0,V)$ 和 $p(0,V)$ 包含零点振动部分的贡献，它们与热运动无关；$U_1(T,V)$ 和 $p_1(T,V)$ 则是热声子的贡献，它们与热运动有关。可以引入频谱密度 $g(\nu,V)$，用积分代替式(4)中的求和，并由条件 $\int_0^{\nu_m}g(\nu,V)d\nu=3N$ 来确定最大频率 ν_m，它与 V 有关。取近似

$$-\frac{\partial\ln\nu_i}{\partial\ln V}=\gamma(V) \tag{5}$$

它与 i 无关。由式(3)、(4)和(5)即得米-格林艾森方程

$$p(T,V)=p(0,V)+\frac{\gamma(V)}{V}[U_1(T,V)-U(0,V)] \tag{6}$$

顺磁物质的磁性　magnetism of paramagnetic substance　将组成这类物质的原子(或分子)看做固有磁矩为 μ_B(玻尔磁子)的磁偶极子，热运动使磁偶极子空间取向是随机的，因而物质不

显示磁性。若加上外磁场 $\boldsymbol{B}$,则各个磁矩不同程度地转到 $\boldsymbol{B}$ 的方向。达到平衡时,所有偶极子磁矩沿 $\boldsymbol{B}$ 方向的分量就是系统的总磁矩 M。以 μ_z 表示 μ_B 沿 $\boldsymbol{B}$ 方向的分量,引入磁量子数 m_J(可取整数或半整数),则有

$$\mu_z = g m_J \mu_B,$$
$$m_J = -J, -J+1, \cdots, J-1, J \qquad (1)$$

其中 g 与物质有关,称为 Landé 因子。应用玻尔兹曼分布可算出磁矩分量的平均值 $\bar{\mu}_z$ 及磁化强度 $\bar{M}$

$$\begin{aligned}\bar{\mu}_z &= \sum_{m_J} \mu_z N_1 \Big/ \sum_{m_J} N_1 \\ &= \sum_{m_J} g m_J \mu_B \mathrm{e}^{-\beta u} \Big/ \sum_{m_J} \mathrm{e}^{-\beta u} \\ &= J g \mu_B B_J(x)\end{aligned}$$

$$\left(x = \beta J g \mu_B B,\ \beta = \frac{1}{k_B T} \right) \qquad (2)$$

$$\bar{M} = \frac{N\bar{\mu}_z}{V} = n J g \mu_B B_J(x) \qquad (3)$$

式中 $u = -\mu_B \cdot \boldsymbol{B} = -g m_J \mu_B B$ 是磁矩 μ_B 在磁场中的位能,

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{x}{2J}\right) \qquad (4)$$

称为布里渊函数。若 $x \ll 1$,则 $B_J(x) \approx \dfrac{J+1}{3J}x$,由式(3)得

$$\bar{M} = \frac{nJ(J+1)g^2\mu_B^2}{3k_B T}B,$$

$$\chi = \frac{\partial \bar{M}}{\partial B} = n\frac{J(J+1)g^2\mu_B^2}{3k_B T} \qquad (5)$$

χ 为磁化系数。可见在高温弱磁场下,得到居里定律。若取 $J = \dfrac{1}{2}$,则 $B_{\frac{1}{2}}(x) = \tanh x$,于是

$$\chi = n g^2 \mu_B^2 / 4 k_B T \qquad (6)$$

在 $J \to \infty$ 和 $g\mu_B J \to \mu_0$ 极限下,过渡到经典情形:式(1)变为 $\mu_z = \mu_0 \cos\theta$,式(4)右端化为朗之万函数 $L(x)$:

$$B_\infty(x) = \coth x - \frac{1}{x} = L(x) \qquad (7)$$

式(3)以及磁化系数变为

$$\bar{M} = n\mu_0 L\left(\frac{\mu_0 B}{k_B T}\right),\ \chi = \frac{n\mu_0^2}{3k_B T} \qquad (8)$$

在 $x \ll 1$ 和 $x \gg 1$ 两种极限下,式(8)中 $\bar{M}$ 分别取如下形式

$$\bar{M} = n\mu_0^2 B / k_B T,\ (\mu_0 B / k_B T \ll 1);$$
$$\bar{M} = n\mu_0,\ \left(\frac{\mu_0 B}{k_B T} \gg 1\right) \qquad (9)$$

表明在高温弱磁场极限下,变为居里定律(Curie law)$\chi \sim \dfrac{1}{T}$;在低温强磁场极限下,磁化达到饱和。

顺磁物质原子磁矩分量的平均值 average value of atomic magnetic moment component for paramagnetic substance 见“顺磁物质的磁性”。

顺磁物质的磁化强度 magnetization intensity of paramagnetic subslance 见“顺磁物质的磁性”。

光子气体 photon gas 1905 年爱因斯坦提出光量子概念,成功地解释了光电效应,康普顿实验证实了光的粒子性。光子之间是彼此独立的。光波是电磁波,故可认为电磁场例如空腔辐射场是由大量光子组成的理想气体。光子具有不同的能量和动量,其自旋是 1,但有两个可能的取向,简并度为 $\omega_s = 2$,这是因为电磁波是横波,有两种偏振态。光子的静止质量 $m = 0$,按相对论公式 $\varepsilon = \sqrt{m^2c^2 + p^2}\,c - mc^2$,光子的能量为

$$\varepsilon = cp = c\hbar k = h\nu \qquad (1)$$

其中 $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$,$\boldsymbol{p}$ 是光子的动量,$\boldsymbol{k}$ 和 ν 是电磁波的波矢和频率。光子与物质相互作用会发生光子的湮灭与产生过程,当电磁场与腔壁交换光子达到平衡即光子气体处于平衡态时,总粒子数守恒条件不能成立,平均粒子数由以下平衡条件确定

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V} = 0 = \mu \qquad (2)$$

式中 F 是自由能。式(2)表明光子的化学势等于零。可以说,作为玻色子的光子组成的气体是简并性的理想玻色气体,其平衡分布为

$$\bar{n}=\frac{1}{e^{\varepsilon/k_BT}-1}=\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1}$$

（B－E 分布） (3)

能量在 $\varepsilon\sim\varepsilon+d\varepsilon$ 间隔内的状态数可表示为

$$g(\varepsilon)d\varepsilon=\omega_s V4\pi p^2 dp/h^3 =\frac{8\pi V}{c^3h^3}\varepsilon^2 d\varepsilon \quad (4)$$

其中 $g(\varepsilon)=\frac{8\pi V}{c^3h^3}\varepsilon^2$ 为态密度。辐射场单位体积内，频率在 $\nu\sim\nu+d\nu$ 间隔内的光子数和能量分别是

$$n(\nu)d\nu=\frac{8\pi}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1}\nu^2 d\nu \quad (5)$$

$$u(\nu)d\nu=\frac{8\pi}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1}h\nu^3 d\nu \quad (6)$$

式中 $n(\nu)$ 和 $u(\nu)$ 是频率为 ν 的光子数密度和能量密度。式(6)就是普朗克黑体辐射公式。光子气体的内能 U、物态方程和熵 S 分别为

$$U=\frac{8\pi^5 V}{15}\left(\frac{k_BT}{hc}\right)^3 k_BT \quad (7)$$

$$p=\frac{8\pi^5}{45h^3c^3}(k_BT)^4=\frac{1}{3}\frac{U}{V} \quad (8)$$

$$S=\frac{32}{45}\pi^5 Vk_B\left(\frac{k_BT}{hc}\right)^3 \quad (9)$$

式(7)表明 $U\propto T^4$，式(8)是相对论性量子理想气体物态方程的普遍形式，式(9)表明当 $T\to 0\ K$ 时，$S\to 0$，符合热力学第三定律。

光子气体的平衡分布 equilibrium distribution of photon gas 见“光子气体”。

光子气体的态密度 state density of photon gas 见“光子气体”。

光子气体的热力学量 thermodynamic quantities of photon gas 见“光子气体”。

准粒子 quasiparticle 粒子间存在相互作用的宏观系统的能量不再是单个粒子能量之和，粒子间相互影响，彼此牵动，单粒子的状态和能量失去意义。在低温下，从巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 的表示式中含有因子 $e^{-E_j(N)/k_BT}$ 看到，只有那些低激发态才对 $\mathscr{Z}$ 有显著贡献，或者说，系统的低激发态能谱决定了热力学性质。实验和理论证实，相互作用系统的低激发态是一群准粒子的集合。准粒子也是一种元激发，它所涉及到的不是一个粒子，而是多个粒子的集体行为，属于整个系统，例如声子是多原子的集体振动的产物，准电子是电子和它的周围裹着时时被它极化了的正电荷云共同组成的复合体。准粒子在空间不是局域的而是扩展分布的，它可看做是系统中具有一定能量、动量且满足某种色散律的稳定激发谱支，如声子型激发、电子型激发等。要使准粒子图像适用，必须元激发有足够的寿命，这就要求：温度足够低，元激发数目不太多，准粒子之间及其同它种粒子之间相互作用很弱。准粒子有许多种，例如声子（晶体、液体），准电子、准空穴、激子（半导体），磁子（铁磁材料），激化子（离子晶体），等离子体量子（等离子体），旋子和声子（超流液氦）等等。采用准粒子图像需要确定(1)准粒子能谱 $\varepsilon(\boldsymbol{p})$；(2)准粒子所遵从的统计法；(3)准粒子的散射机制。

声子气体 phonon gas 独立的玻色子–声子组成的理想系统。通过引入简正坐标将 N 个原子的晶格振动化为一系列格波（单色平面波）的叠加，格波用波矢 $\boldsymbol{k}$ 和频率 $\nu_r(\boldsymbol{k})$ 来描述，r 是偏振标记，若每一晶胞中只有一个原子，则每个 $\boldsymbol{k}$ 有三个不同的偏振，分别对应于两个横波和一个纵波。本征能量为

$$E_{\{n_{r,\boldsymbol{k}}\}}=\sum_{r,\boldsymbol{k}}\left(n_{r,\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2}\right)h\nu_r(\boldsymbol{k}), \quad (1)$$

$$(n_{r,\boldsymbol{k}}=0,1,2,\cdots)$$

按量子力学对应原理，$(\boldsymbol{k},\nu_r(\boldsymbol{k}))$ 的格波对应于一群准动量为 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$，能量为 $\varepsilon_r(\boldsymbol{k})=h\nu_r(\boldsymbol{k})$ 的声子，因而有 $\varepsilon_r=pc$（c：声速）。表征格波状态的正整数 $n_{r,\boldsymbol{k}}$ 代表这种声子的数目。声子不是真实的粒子，而是一种元激发，又称为准粒子，也是固体中弹性波的能量量子，是原子集体振动的量子化产物，它在空间不是局域的，而是扩展分布的，有一定的能量和动量。声子因其数目的不确定性，故化学势 $\mu=0$，服从玻色–爱因斯坦统计，其平衡分布为

$$n_\nu=\frac{1}{e^{h\nu/k_BT}-1} \quad (2)$$

声子气体在频率 $\nu \sim \nu+d\nu$ 间隔内量子态数为

$$g(\nu)d\nu = \frac{4\pi V}{h^3}\left(\frac{2}{c_t^3}+\frac{1}{c_l^3}\right)\nu^2 d\nu \qquad (3)$$

式中 c_t 和 c_l 是横波和纵波速度，$g(\nu)$ 为态密度。内能 U、比热容 C_V 为

$$U = \frac{9N}{\nu_m^3}\int_0^{\nu_m}\frac{h\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1}d\nu \qquad (4)$$

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{V,N} = \frac{9Nk_B}{\nu_m^3}\left(\frac{h}{k_BT}\right)^2 \times \int_0^{\nu_m}\frac{e^{h\nu/k_BT}}{(e^{h\nu/k_BT}-1)^2}d\nu \qquad (5)$$

式中 $\nu_m = \left[\dfrac{9N}{4\pi V\left(\dfrac{2}{c_t^3}+\dfrac{1}{c_l^3}\right)}\right]^{1/3}$ 是最大频率。由于声子代表格波所激发的能量，故式(4)中不会出现零点能量。式(5)与德拜比热容理论结果一致。实际上晶格振动中还包含非谐振动成分，它可化为声子之间的相互作用，此外还有晶格振动之间以及与电子运动的相互影响等，情况十分复杂。高温下非谐效应相当大时，声子图像变得模糊起来，声子概念就不适用了。

声子气体的平衡分布 equilibrium distribution of phonon gas 见“声子气体”。

声子气体的态密度 state density of phonon gas 见“声子气体”。

声子气体的内能 internal energy of phonon gas 见“声子气体”。

声子气体的比热容 specific heat capacity of phonon gas 见“声子气体”。

理想玻色气体的热力学量公式 thermodynamic quantities formula of ideal Bose gas 考虑粒子质量 m、化学势 μ 均不为零，非相对论性的理想玻色气体，其平衡分布可表示为

$$n_\varepsilon = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} = ze^{-\beta\varepsilon}/(1-ze^{-\beta\varepsilon})\left(\beta=\frac{1}{k_BT}\right) \qquad (1)$$

式中 $z=e^{\mu/k_BT}$ 为易逸度。由于 n_ε 必须是正的，故要求 $ze^{-\beta\varepsilon}<1$ 于是可将式(1)展成 $ze^{-\beta\varepsilon}$ 的幂级数。计算得到

$$\begin{aligned}\langle N\rangle &= \frac{\omega_s V}{h^3}\int d\boldsymbol{p}\, n_\varepsilon \\ &= \frac{\omega_s V}{4\pi^2}\left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right)^{3/2}\int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{1/2} ze^{-\beta\varepsilon} \cdot (1+ze^{-\beta\varepsilon}+z^2e^{-2\beta\varepsilon}+\cdots) \\ &= \frac{\omega_s V}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{3/2}}\end{aligned} \qquad (2)$$

$$\begin{aligned}U &= \frac{\omega_s V}{h^3}\int d\boldsymbol{p}\, n_\varepsilon \varepsilon \\ &= \frac{\omega_s V}{4\pi^2}\left(\frac{8\pi^2 m}{h^2}\right)^{3/2} \cdot \int_0^\infty d\varepsilon\,\varepsilon^{3/2} ze^{-\beta\varepsilon}(1+ze^{-\beta\varepsilon}+z^2e^{-2\beta\varepsilon}+\cdots) \\ &= \frac{3}{2}k_BT\frac{\omega_s V}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}}\end{aligned} \qquad (3)$$

式中 ω_s 是粒子自旋简并度，$\lambda_T \equiv \left(\dfrac{h^2}{2\pi m k_B T}\right)^{1/2}$ 为热波长。压强 p 和熵 S 分别为

$$p = \frac{2}{3}\frac{U}{V} = \frac{\omega_s k_B T}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^\infty \frac{z^l}{l^{5/2}} \qquad (4)$$

$$\begin{aligned}S &= \frac{U+pV-\mu\langle N\rangle}{T} \\ &= \frac{5}{2}\frac{\omega_s V}{\lambda_T^3}k_BT\sum_{l=1}^\infty\frac{z^l}{l^{5/2}} - \frac{\omega_s V}{\lambda_T^3}\mu\sum_{l=1}^\infty\frac{z^l}{l^{3/2}}\end{aligned} \qquad (5)$$

玻色-爱因斯坦凝聚 Bose-Einstein condensation 1925 年爱因斯坦把玻色的光子状态计数的重要思想用于理想气体，预言：气体在一定临界温度 T_C 下发生“凝聚”，即部分(宏观数量)的原子占据动量为零的最低量子态，其他原子组成“饱和理想气体”。这种凝聚现象称为 BEC，它也是一种相变。这里所说的理想气体实际上是理想玻色气体。在方程

$$\frac{pV}{k_BT} = -\sum_\varepsilon \ln(1-ze^{-\beta\varepsilon}),$$

$$N = \sum_\varepsilon n_\varepsilon = \sum_\varepsilon \frac{1}{z^{-1}e^{\beta\varepsilon}-1} \qquad (1)$$

$$\left(z \equiv e^{\beta\mu}, \beta \equiv \frac{1}{k_BT}\right)$$

中，当易逸度 $z\to 1$ 时，与单粒子态能量 $\varepsilon=0$ 对应的项趋于∞，求和是发散的，故必须将此

项分开。若以 $\xi \equiv \frac{N_0}{N}$表示 $\varepsilon=0$ 上的平均粒子数 N_0 占总粒子数 N 的百分比，ω_s 表示粒子的自旋简并度，则可得到

$$\frac{p}{k_B T}=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{5/2}}-V^{-1}\ln(1-z),$$

$$n=\frac{N}{V}=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{3/2}}+\frac{N_0}{V}$$

$$=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{3/2}}+\xi n \qquad (2)$$

随着温度 T 或密度 n 的改变，ξ 和 z 的取值均在 0 和 1 之间变化，可以认为系统存在两个不同的相：气相（Ⅰ相）和凝聚相（Ⅱ相）。Ⅰ相：$N_0=0(1)$，相当于系统处于高温和/或低密度区，当 $N\to\infty$ 时，有 $\lim\limits_{N\to\infty}\xi=0$，$1\geqslant z\geqslant 0$，$\left(z=\frac{N_0}{N_0+1}\right)$，式(2)中两式最后一项都可略去，变为高温方程；Ⅱ相：$N_0=0(N)$，相当于系统处于低温和/或高密度区，当 $N\to\infty$ 时，有 $\lim\limits_{N\to\infty}z=1$，$1\geqslant\xi\geqslant 0$，此时式(2)变为如下两个方程

$$\frac{p}{k_B T}=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l^{5/2}}=\frac{(1.341)}{\lambda_T^3}\omega_s,$$

$$n=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l^{3/2}}+\xi n$$

$$=\frac{\omega_s(2.612)}{\lambda_T^3}+\xi n \qquad (3)$$

当系统处于Ⅰ相时，若降低温度或加大密度，则 z 由 $0\to 1$，进入Ⅱ相，z 不再改变（化学势 $\mu=0$ 的界限不能越过），求和 $\sum\limits_{l=1}^{\infty}\frac{z^l}{l^{5/2}}$ 不再改变，随着 ξ 由 $0\to 1$，n 由 $n_c=\frac{\omega_s(2.612)}{\lambda_T^3}$开始越来越大，但$\left(\frac{n\lambda_T^3}{\omega_s}\right)_{z=1}$的变化只能来自$\frac{N_0}{V}\lambda_T^3$，于是零动量态或最低能态上开始为宏观数量的粒子占据。可见，发生这种凝聚现象时，必须满足 $\lambda_T^3 n/\omega_s\geqslant 2.612$。或者说，当温度 T 低于临界温度 T_c

$$T_c=\frac{h^2}{2\pi m k_B}\left(\frac{n}{2.612\,\omega_s}\right)^{2/3} \qquad (4)$$

或密度 n 大于临界密度 n_c

$$n_c=2.612\,\omega_s\left(\frac{2\pi m k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \qquad (5)$$

时发生 BEC。当 $T<T_c$ 时，总粒子数 N 中的一部分 $N_0=N\xi(T)=N\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}\right]$ 凝聚于 $\varepsilon=0$（或动量 $p=0$）的基态上，另一部分 $N^*=N-N_0=N\left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}$ 则分布在各激发态上。可将系统看做是两相的混合。现把 BEC 模拟气液相变。由式(3)中第 1 式即可得到转变线方程

$$p_0 V_c^{5/3}=常数$$

$$\left[临界比容\ v_c=\frac{1}{n_c}=\frac{\lambda_T^3}{2.612\,\omega_s}\right] \qquad (6)$$

如图 1 所示。在形式上把激发态上每个粒子的体积看做 v_c，基态的每个粒子的体积认为是零。图 1 中 D 点代表气相，C 点表示凝聚相，CD 为两相的混合。“蒸气”压 p_0 的表示式就是式(3)中的第 1 式，它是 $p-T$ 图上的转变线方程，图 2 表示转变线，其右边是气相，本身为凝聚相。容易求得 $B-E$ 相变的克拉贝龙(Clapeyron)方程。

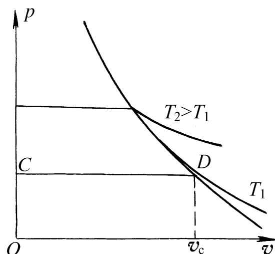


图 1

$$\frac{dp_0}{dT}=\frac{\frac{5}{2}k_B T\omega_s(1.341)/(2.612)}{T(v_c-0)}$$

$$=\frac{L}{T(v_c-0)} \qquad (7)$$

其中 $L=\frac{5}{2}k_B T\omega_s(1.341)/(2.612)$是单个粒子的相变潜热。$BEC$ 虽与通常的气液相变类

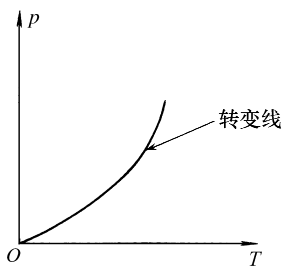


图 2

似，但其发生的原因不是粒子间的相互作用，而在于波函数对称性这种量子力学效应。爱因斯坦这一著名的理论预言终于在70年后成功地实现了。美国科罗拉多大学和国家标准局合办的实验天体物理研究所(JILA)1995年7月13日宣布，在冷却到绝对温度170毫微度的碱金属铷(^{87}Rb)蒸气中观测到了 *BEC*。麻省理工学院(MIT) K.B.Davis 等人于1995年11月发表论文，说在钠(^{23}Na)蒸气中实现了 *BEC*。G.Taube(MIT)在1996年6月发表的文章中宣布，实验中成功地凝聚了500万个钠原子，形状为长度约1/3毫米的短柱体。爱因斯坦的预言是理想玻色气体中的粒子在动量空间的凝聚，出乎人们意料，1995年从实验上观察到的是约束在有限空间中的气体的实际凝聚，这对理论是一个严重的挑战—要求相应的理论必须是能反映对坐标有依赖关系的弱相互作用的玻色气体理论。1995年已在中性碱金属原子中实现 *BEC* 会大大推动已沉寂多年的玻色系统多体理论，并带动和促进超流和超导理论。元素周期表中约有75%的稳定同位素是玻色子，将会有越来越多的玻色原子(包括氢原子)实现 *BEC*，展现美好的应用前景，原子激射器，原子制板等大有希望。

玻色-爱因斯坦凝聚中的两个相 two phases of B-E condensation 见“玻色-爱因斯坦凝聚”。

玻色-爱因斯坦凝聚的临界温度 critical temperature of B-E condensation 见“玻色-爱因斯坦凝聚”。

玻色-爱因斯坦凝聚的临界密度 critical density of B-E condensation 见“玻色-爱因斯坦凝聚”。

玻色-爱因斯坦凝聚的转变线方程 transition line equation of B-E condensation 见“玻色-爱因斯坦凝聚”。

玻色-爱因斯坦凝聚的克拉贝龙方程 Clapeyron equation of B-E condensation 见“玻色-爱因斯坦凝聚”。

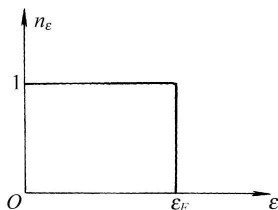
绝对零度电子气体的性质 property of electronic gas at absolute zero 考虑金属中的自由电子气，它是在正电荷背景上自由运动的近独立粒子组成的费米系统，也是量子效应显著的简并性气体。当 $T\to 0\ K$ 时有

$$n_\varepsilon=\lim_{T\to 0}\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}=\begin{cases}1 & \varepsilon<\varepsilon_F\\ 0 & \varepsilon>\varepsilon_F\end{cases}\qquad(1)$$

n_ε 是能量为 ε 的单粒子态上占据的粒子数，ε_F 是绝对零度时的电子的化学势，又称为费米能量。$T=0\ K$ 时，粒子具有的最大动量 p_F 称为费米动量，相应的费米波矢的大小为 k_F，动量空间内半径为 p_F 的球面称为费米球面。p_F 及 k_F 由以下相对论能量公式给出

$$\mu(T=0\ K)\equiv\varepsilon_F=\sqrt{p_F^2+m^2c^2}\,c-mc^2$$
$$=\sqrt{\hbar^2k_F^2+m^2c^2}\,c-mc^2\qquad(2)$$

式(1)表明，粒子从占据最低能量的量子态开始，直至填满能量为 ε_F 的态，如图所示。将总



粒子数 N、内能 U 公式中求和代以积分：$\sum_j\to\frac{\omega_sV}{h^3}\int d\boldsymbol{p}=\frac{\omega_sV}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}$，即可计算出 N、U 以及压强 p

$$N=\frac{\omega_s}{2\pi^2}V\int_0^{k_F}k^2dk=\frac{\omega_s}{6\pi^2}Vk_F^3\qquad(3)$$

$$U=\frac{\omega_s V}{8\pi^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k}n_\varepsilon\varepsilon$$

$$=\begin{cases}\frac{3}{5}N\hbar^2k_F^2/2m=\frac{3}{5}N\varepsilon_F \\ \text{（非相对论性情形）} \\ \frac{3}{4}N\hbar ck_F=\frac{3}{4}N\varepsilon_F \\ \text{（相对论性情形）}\end{cases} \quad (4)$$

$$p=\begin{cases}\frac{3}{2}\frac{U}{V}\propto\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} \\ \text{（非相对论性情形）} \\ \frac{1}{3}\frac{U}{V}\propto\left(\frac{N}{V}\right)^{4/3} \\ \text{（相对论性情形）}\end{cases} \quad (5)$$

式中 ω_s 是自旋简并度。可以看出，在绝对零度时，由于泡利不相容原理，使自由电子仍具有相当大的平均动能$\left(\frac{3}{5}\varepsilon_F \text{或} \frac{3}{4}\varepsilon_F\right)$及平均速度（$v_0\approx10^6\mathrm{m\cdot s^{-1}}$），因此压强并不等于零且比较大，称为零点压强，与粒子数密度的 5/3 次方或 4/3 次方成正比。

费米能量 Fermi energy 见“绝对零度电子气体的性质”。

费米动量和费米波矢 Fermi momentum and Fermi wave vector 见“绝对零度电子气体的性质”。

费米面 Fermi surface 见“绝对零度电子气体的性质”。

绝对零度电子气体的总粒子数 total particle number of electronic gas at absolute zero 见“绝对零度电子气体的性质”。

绝对零度电子气体的内能 internal energy of electronic gas at absolute zero 见“绝对零度电子气体的性质”。

绝对零度电子气体的压强 pressure of electronic gas at absolute zero 见“绝对零度电子气体的性质”。

低温和高密度电子气体的性质 property of electronic gas at low temperature and high density 考虑非相对论性粒子组成的电子气体（理想费米气体）处于很低温度但 $T\neq0$ 的情形。费米球面处有些电子受到热激发而跃迁到球外，在室温 $T=300\mathrm{K}$ 时，$k_BT\approx10^{-9}\mathrm{J}$，比费米能量 ε_F 小得多，因此，只有在费米面附近宽度为 k_BT 的范围内的电子才会发生跃迁，绝大部分电子仍处于基态而不参与热运动（见图 1），

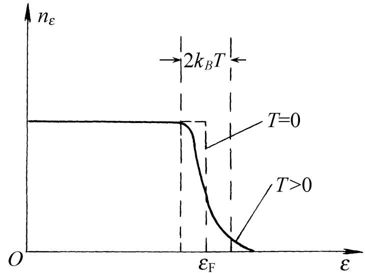


图 1

故化学势 μ 变化很小。可采用近似方法计算 $T\neq0\mathrm{K}$ 电子气体的热力学函数。将

$$\frac{pV}{k_BT}=\sum_j\ln(1+\mathrm{e}^{\beta(-\varepsilon_j+\mu)}),$$

$$N=\sum_j \bar{n}_j=\sum_j\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\varepsilon_j-\mu)}+1} \quad (1)$$

中求和 $\sum_j$ 换成积分 $\frac{\omega_s V}{(2\pi)^3}\int\mathrm{d}\boldsymbol{k}$（$\boldsymbol{k}$：波矢，$\omega_s$：自旋简并度），得到

$$\frac{p}{k_BT}=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^{l+1}z^l/l^{5/2} \quad (2)$$

$$v^{-1}=\frac{N}{V}=\frac{\omega_s}{\lambda_T^3}\sum_{l=1}^{\infty}(-1)^{l+1}z^l/l^{3/2} \quad (3)$$

式中 $z\equiv\mathrm{e}^{\mu/k_BT}$ 为易逸度，这里 z 的值不受限制，λ_T 是热波长。计算得到化学势的表示式

$$\mu\approx\varepsilon_F\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2+\cdots\right]$$

或
$$\mu\approx\varepsilon_F\left[1-\frac{\pi^2}{12}\left(\frac{T}{T_F}\right)^2+\cdots\right] \quad (4)$$

其中 $\varepsilon_F=\frac{h^2}{2m}\left(\frac{3N}{4\pi\omega_sV}\right)^{2/3}$ 是费米能量，T_F 是费米温度，定义为

$$T_F\equiv\frac{\varepsilon_F}{k_B}=\frac{h^2}{2mk_B}\left(\frac{3n}{4\pi\omega_s}\right)^{2/3} \quad (5)$$

它是粒子数密度 n 的函数，低温和高密度意味着 $T\ll T_F$。还可得出内能 U、压强 p 和比热容 C_V 的表示式

$$U=\frac{3}{5}N\varepsilon_F\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2+\cdots\right] \quad (6)$$

$$p=\frac{2}{5}\frac{N}{V}\varepsilon_F\left[1+\frac{5\pi^2}{12}\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)^2+\cdots\right] \quad (7)$$

$$C_V/N=\frac{\pi^2}{2}k_B\frac{k_BT}{\varepsilon_F}+\cdots \quad (8)$$

式(6)和(7)在 $T\to 0$K 极限情形下,即得基态的结果。式(8)表明,C_V/N 与高温 $T\to\infty$时趋于$\frac{3}{2}k_B$不同,而是与温度的一次方成正比。图2给出$\frac{C_V}{Nk_B}-\frac{T}{T_F}$曲线。对式(8)可作如下定性分析:当 $T>0$K 但非常低时,只有在费米面附近 k_BT 范围内的粒子对系统的热力学性质做出贡献,它们被激发到能量约为 $\varepsilon=\varepsilon_F+k_BT$ 范围内的态,这种粒子数近似等于$\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)N$,因而在基态之上总激发能为 $\Delta U\approx\left(\frac{k_BT}{\varepsilon_F}\right)Nk_BT$,因此 $C_V/N\approx\frac{k_BT}{\varepsilon_F}k_B$。容易得到熵

$$\frac{S}{N}=\frac{1}{N}\left(\frac{U+pV-N\mu}{T}\right)=\frac{k_B}{2}\pi^2\frac{k_BT}{\varepsilon_F} \quad (9)$$

从式(8)和(9)看出,当 $T\to 0$K 时,$C_V\to 0$,$S\to 0$,与热力学第三定律相符。

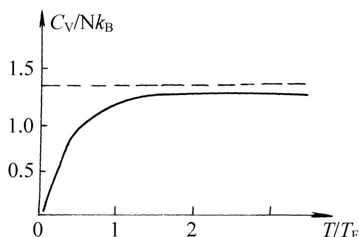


图2

低温和高密度电子气体的化学势 chemical potential of electronic gas at low temperature and high density 见“低温和高密度电子气体的性质”。

费米温度 Fermi temperature 见“低温和高密度电子气体的性质”。

低温和高密度电子气体的热力学量 thermodynamic quantities of electronic gas at low temperature and high density 见“低温和高密度电子气体的性质”。

金属表面的热电子发射 thermoelectron emission of metal surface 金属中自由电子的动能大于金属离子形成的势阱的深度 W 时才可能逸出金属表面,常温下电子逸出的概率几乎为零,高温时有足够数量的电子逸出,形成热电子发射的里查逊(Richardson)效应。可将这种发射过程当做准静态过程来处理。可利用费米–狄拉克分布。

$$n_\varepsilon=\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1} \quad (1)$$

计算发射的热电子流。取 x 轴为垂直于金属表面的方向,化学势 $\mu\approx\mu_0\equiv\varepsilon_F$,$\varepsilon_F$ 是费米能级,电子自旋简并度 $\omega_s=2$,只有动能 $\varepsilon_k=p_x^2/2m\geqslant W$ 的电子才可能逸出表面。单位时间内单位面积发射的电子数为

$$\begin{aligned}R&=\frac{1}{\mathrm{d}A\mathrm{d}t}\int_{p_x^2/2m\geqslant W}\mathrm{d}n\\&=\frac{2}{h^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\int_{\sqrt{2mW}}^{\infty}\mathrm{d}p_x n_\varepsilon v_x\\&=\frac{2}{h^3}\iint_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\int_{\varepsilon_m}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu_0)/k_BT}+1}\\&=\frac{2k_BT}{h^3}\iint_{-\infty}^{\infty}\ln\left[1+e^{-\varepsilon'/k_BT}\right]\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z\end{aligned} \quad (2)$$

R 称为热电子发射率,$\varepsilon_m=W+\frac{1}{2m}(p_y^2+p_z^2)$,$\varepsilon'=W-\mu_0+\frac{1}{2m}(p_y^2+p_z^2)$,常温下 $\varepsilon'\gg k_BT$,由式(2)即可求得热电子发射的电流密度

$$J=eR=\frac{4\pi mek_B^2}{h^3}T^2\cdot\exp\left[-(W-\mu_0)/k_BT\right] \quad (3)$$

式(3)中 $W-\mu_0=\varphi$ 为逸出功,其数量级为几个 eV。式(3)与实验相符,它明显优于经典统计导出的公式 $J\propto\sqrt{T}e^{-\varphi/k_BT}$。引入返回率 R',它是单位时间内通过单位表面进入金属的电子数,建立动态平衡时,应有

$$R=R' \quad (4)$$

此时,金属外的电子气也达到平衡,由于电子气密度很小,容易算出巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 的对数,将 $\ln\mathscr{Z}=\sum_j \ln(1+e^{(\mu-\varepsilon_j)/k_BT})$ 中求和代以积分,则有

$$\ln\mathscr{Z}=\frac{4\pi V}{h^3}(2m)^{3/2}\cdot\int_0^\infty d\varepsilon\sqrt{\varepsilon}\ln(1+e^{(\mu-\varepsilon)/k_BT})$$

$$\approx\frac{2V}{h^3}(2\pi mk_BT)^{3/2}e^{\mu/k_BT}\qquad(5)$$

式(5)中最后一个等式是在 $e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}\gg 1$ 下得到的。逸出的电子气压强 p 和 R' 为

$$p=k_BT\frac{\partial\ln\mathscr{Z}}{\partial V}$$

$$=\frac{2k_BT}{h^3}(2\pi mk_BT)^{3/2}\exp(\mu'/k_BT)\qquad(6)$$

$$R'=\frac{1}{4}n\bar{v}=\frac{1}{4}\frac{p}{k_BT}\left(\frac{8k_BT}{\pi m}\right)^{1/2}$$

$$=\frac{4\pi m}{h^3}(k_BT)^2\exp\left(\frac{\mu'}{k_BT}\right)\qquad(7)$$

式中 $\mu'=\mu-W$ 是空间电荷的化学势。(7)式两端乘以电子电量 e 即得式(3)。

里查逊效应　Richardson effect　见"金属表面的热电子发射"。

热电子发射率　thermoelectron emissivity　见"金属表面的热电子发射"。

热电子发射的电流密度　current density of thermoelectron emission　见"金属表面的热电子发射"。

逸出电子的返回率　return rate of escaping electron　见"金属表面的热电子发射"。

逸出电子气的压强　pressure of escaping electron gas　见"金属表面的热电子发射"。

白矮星及其统计性质　white dwarf star and its statistical property　白矮星是天体中一种白色星球,不遵从星体的亮度与颜色(即发射的主要波长)成正比的经验规则,它是恒星核能耗尽后经引力坍缩而形成的密度极大的星体。考虑一个理想化模型:所含的大多数是氦元素,密度 $\rho\approx10^4\text{kg/cm}^3\approx10^7\rho_s$,质量 $M\approx10^{30}\text{kg}\approx M_s$,中心温度 $T\approx10^7\text{K}\approx T_s$,这里下标 s 是表示太阳的量。氦原子已完全电离,故将星体看做由氦核和电子组成的气体,电子气的密度 $n\approx10^{36}/m^3$,相应的费米能量、费米动量和费米温度为 $\varepsilon_F=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{2/3}\approx10^{-12}J$,

$p_F=\sqrt{2m\varepsilon_F}\approx10^{-21}\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$, $T_F=\frac{\varepsilon_F}{k_B}\approx10^{11}\text{K}$。

由于 $T_F\gg T$,可将电子气体当做高度简并的处于绝对零度的理想气体。电子气的总能量为

$$E_0=\sum_{|\boldsymbol{p}|\leqslant p_F}\left[(p^2c^2+m^2c^4)^{1/2}-mc^2\right]$$

$$=\frac{8\pi V}{h^3}\int_0^{p_F}\left[(p^2c^2+m^2c^4)^{1/2}-mc^2\right]p^2dp$$

$$=\frac{8\pi V}{h^3}m^4c^5f(x_F),$$

$$f(x_F)=\begin{cases}\frac{x_F^3}{3}\left(1+\frac{3}{10}x_F^2+\cdots\right)\\(x_F\ll1)\\\frac{x_F^4}{4}(1+x_F^{-2}+\cdots)\\(x_F\gg1)\end{cases}\qquad(1)$$

其中 $x_F=p_F/mc=\frac{h}{2\pi mc}(3\pi^2n)^{1/3}$, $x_F\ll1$:非相对论性情形,$x_F\gg1$:相对论性情形。星体的总质量 M、半径 R 和电子数密度 n 以及 x_F 为

$$M=(m+2m_p)N\approx2m_pN,$$

$$R=\left(\frac{3V}{4\pi}\right)^{1/3},$$

$$n=\frac{N}{V}=\frac{3M}{8\pi R^3m_p},$$

$$x_F=\frac{\bar{M}^{1/3}}{\bar{R}}\qquad(2)$$

式中 m_p 是质子的质量。M 和 R 的平均值以及电子气的压强 p_0 分别为

$$\bar{M}=\frac{9\pi}{8}\frac{M}{m_p},\ \bar{R}=\frac{2\pi mc}{h}R\qquad(3)$$

$$p_0=-\frac{\partial E_0}{\partial V}\approx\begin{cases}\frac{8\pi m^4c^5}{15h^3}x_F^5=\frac{4}{5}K\left(\frac{\bar{M}^{5/3}}{\bar{R}^5}\right)\\(x_F\ll1,\text{非相对论性情形})\\\frac{2\pi m^4c^5}{3h^3}(x_F^4-x_F^2)\\=K\left(\frac{\bar{M}^{4/3}}{\bar{R}^4}-\frac{\bar{M}^{2/3}}{\bar{R}^2}\right)\\(x_F\gg1,\text{相对论性情形})\end{cases}\qquad(4)$$

$$K=\frac{mc^2}{12\pi^2}\left(\frac{2\pi mc}{h}\right)^3 \tag{5}$$

白矮星靠电子气的巨大零点压强(式(4))与万有引力平衡而维持着。利用球形星体因绝热膨胀引起的能量变化和引力势能的变化的平衡条件得到

$$p_0=\frac{\alpha G}{4\pi}\frac{M^2}{R}=K'\frac{\overline{M}^2}{\overline{R}^4},$$

$$K'=\frac{\alpha G}{4\pi}\frac{8}{9\pi}\frac{m_p}{}\left(\frac{2\pi mc}{h}\right)^4 \tag{6}$$

(G:引力常数)

式中 α 是与球内空间分布有关的量级为 1 的数。于是

$$\overline{M}^{1/3}\overline{R}=\frac{4}{5}\frac{K}{K'} \tag{7}$$

($x_F\ll 1$,非相对论性情形)

$$\overline{R}=\overline{M}^{2/3}\left[1-\left(\frac{\overline{M}}{\overline{M}_0}\right)^{2/3}\right]^{1/2},$$

$$\left(\overline{M}_0=\left(\frac{K}{K'}\right)^{3/2}\right) \tag{8}$$

($x_F\gg 1$,相对论性情形)

式(7)表明,白矮星的半径随着质量增加而减小,这个结论对小密度或对小的质量和大的半径是有效的。式(8)适用于高密度或相对论效应显著的情形,它要求 $M\leqslant M_0$。再与式(3)中第 1 式比较,即有

$$M\leqslant\frac{8}{9\pi}\frac{m_p}{}M_0=\frac{9\sqrt{3}}{64\pi m_p^2}\left(\frac{ch}{2\alpha G}\right)^{3/2}$$

$$=M_m \tag{9}$$

式(9)是白矮星质量极限公式。若令 $\alpha=1$,并对气体电离度修正后得到星体质量的最大值为 $M_m\approx 10^{30}\,\mathrm{kg}\approx 1.4\,M_s$,相当于太阳质量的 1.4 倍,这个值称为钱德拉塞卡(Chandrasekkar)极限(1939)。其物理意义在于当白矮星的质量超过极限值时,基态压强就不能抗衡引力坍缩的趋势。天文观察结果证实所有的白矮星质量均小于这个极限。上述结果充分说明费米-狄拉克统计用于白矮星获得了成功。

钱德拉塞卡极限 Chandrasekkar limit 见“白矮星及其统计性质”。

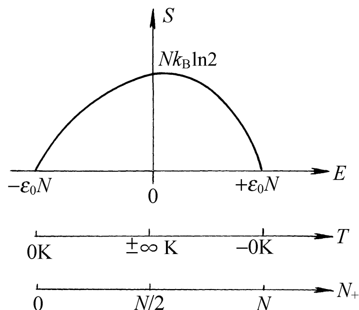
负绝对温度 negative absolute temperature 对于某些系统,有时内能增加,反而使熵减小,此时系统处于负绝对温度状态。这种状态实际上是一种非平衡状态,由于引入负绝对温度的概念,将它变为平衡态问题来处理。考虑 N 个自旋为 1/2、磁矩为 μ_0 的粒子系统,忽略自旋相互作用,当系统置于磁场 $\boldsymbol{B}$ 中时,粒子的能量取两个可能的值 $\pm\varepsilon_0=\pm\mu_0 B$,以 N_+ 和 N_- 分别表示系统在某一状态下,高能级 $+\varepsilon_0$ 和低能级 $-\varepsilon_0$ 上的粒子数,设系统的能量和熵为 E 和 S,则有

$$N_{\pm}=\frac{N}{2}\left(1\pm\frac{E}{\varepsilon_0 N}\right) \tag{1}$$

$$\begin{aligned}S&=k_B\ln\frac{N!}{N_-!\,N_+!}\\&=Nk_B\left[\ln 2-\frac{1}{2}\left(1-\frac{E}{N\varepsilon_0}\right)\ln\left(1-\frac{E}{N\varepsilon_0}\right)\right.\\&\left.\quad-\frac{1}{2}\left(1+\frac{E}{N\varepsilon_0}\right)\ln\left(1+\frac{E}{N\varepsilon_0}\right)\right]\end{aligned} \tag{2}$$

$$\frac{1}{T}=\left(\frac{\partial S}{\partial E}\right)_{N,B}=\frac{k_B}{2\varepsilon_0}\ln\frac{N\varepsilon_0-E}{N\varepsilon_0+E} \tag{3}$$

将式(2),(3)和式(1)分别给出的 $S-E$,$T-E$ 和 N_+-E 关系示于下图。可见,$E<0$ 时,S 的斜率为正,故总有 $N_+<N_-$,即低能级的



核自旋系统的熵

粒子占有数大于高能级的粒子数,而在负温区

内，T 从 $-\infty$ 增至 $-0\ K$，N_+ 将由 $\frac{N}{2}$ 增至 N，故总有 $N_+ > N_-$，即高能级的粒子占有数大于低能级的粒子数，这与平衡分布规律完全相反，故称负绝对温度下粒子占有数分布为粒子数反转态。负温度是越过 $T=\infty$K的一种温度状态，它与正温度描述的平衡态不同，但大多数的热力学基本概念和定律与正温度的一样。负绝对温度的系统不是一个正常的系统，负温度状态需要通过特别的方法来实现，珀塞耳(Purcell)和庞德(Pound)实验(1951)确定了这种状态。负绝对温度的概念可用于核自旋系统、激光器、顺磁物质以及微波量子放大器等。

粒子数反转态　inverted state of particle number　见“负绝对温度”。

珀塞尔–庞德实验　Purcell-Pound experiment

珀塞尔和庞德 1951 年为研究负绝对温度状态问题所做的实验。他们将 LiF 晶体置于 $\boldsymbol{B}=$ 100Oe(奥斯特)的磁场中，调节 LiF 核自旋系统至 5K 左右的热平衡状态，此时低能级的粒子数 N_- 大于高能级的粒子数 N_+，而后在极短时间(约 0.2μs)内将磁场迅速反转成 -100 Oe。由于核自旋的进动周期为 1μs，故不可能随磁场反转，大多数粒子的自旋由原来与 $\boldsymbol{B}$ 同向而变成与 $\boldsymbol{B}$ 反向，于是出现 $N_+ > N_-$ 的负温度状态(实验中约 -10K)。核自旋与晶格之间的弛豫时间(即彼此交换能量达到平衡所需时间)约为 5 分钟，但核自旋本身的弛豫时间(即互相交换光子达到平衡所需时间)仅为 10μs，故这些负温度状态可持续大约 5 分钟。可见负绝对温度状态只是出现在非稳定系统的一种短暂的平衡态。

五、涨落、相关函数和涨落耗散定理
Fluctuation, Correlation Function and Fluctuation-dissipation Theorem

涨落　fluctuation　宏观的平衡态是一种动态平衡，处于平衡态的系统总是发生着随机性的偏离平衡态的变化，这就是涨落现象。它是大数粒子的一种统计平均性的行为，也是宏观系统的一种统计规律性。涨落分两类：围绕平均值的涨落和以布朗运动为代表的涨落。前者是由于物质不连续性引起的宏观量在平均值附近的起伏。若系统所包含的粒子数很大，则宏观量观测值的涨落很小，往往可以忽略。若系统很小，涨落就比较显著，此时若观测手段精确，仪器灵敏，涨落就可能被观测到。处于临界状态系统的物理量会发生显著的涨落。主要运用爱因斯坦公式来计算这类涨落。后者是由于作热运动的大量媒质分子对宏观物质颗粒的无规则碰撞，导致物质颗粒在涨落力作用下作随机运动而引起的涨落、例如扭摆运动的涨落、电路中的涨落、灯丝电子发射的涨落等等，研究的主要手段是朗之万方法。通常采用均方涨落或相对涨落来描述涨落的大小，以 $\Delta B = B - \langle B\rangle$ 表示某物理量 B 对其统计平均值 $\langle B\rangle$ 的偏离，则均方涨落可表示为

$$\langle(\Delta B)^2\rangle = \langle(B-\langle B\rangle)^2\rangle = \langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2$$

相对涨落可表示为

$$\sqrt{\frac{\langle(\Delta B)^2\rangle}{\langle B\rangle^2}} = \sqrt{\frac{\langle(B-\langle B\rangle)^2\rangle}{\langle B\rangle^2}} = \sqrt{\frac{\langle B^2\rangle-\langle B\rangle^2}{\langle B\rangle^2}}$$

均方涨落　average square fluctuation　看“涨落”。

相对涨落　relative fluctuation　看“涨落”。

爱因斯坦涨落公式　Einstein formula of fluctuation　研究物理量围绕平均值的涨落，可以利用爱因斯坦涨落公式。玻尔兹曼公式给出处于统计平衡的孤立系的熵 S' 与微观状态数 $\Omega'(E,\Delta E)$ 的关系

$$S' = k_B \ln \Omega'(E,\Delta E) = k_B \ln \Omega' \qquad (1)$$

式(1)可用于偏离平衡的情形。考虑一由系统Ⅰ和媒质Ⅱ组成的大孤立系统，其总的微观状态数为 Ω'，若系统Ⅰ处于某个宏观态时，大孤立系统的微观状态数为 Ω，熵为 S，则相应的概率可表示为

$$W = \frac{\Omega}{\Omega'} = 常数\ e^{S/k_B}$$

或

$$W = W_0 e^{(S-S_0)/k_B} = W_0 e^{\Delta S/k_B} \qquad (2)$$

其中角标“0”对应于热力学平衡态，ΔS 代表大孤立系在涨落过程中熵的变化。式(2)称为爱因斯坦涨落公式，它给出系统偏离平衡态的概率分布。若系统和媒质均可看做由 k 种物质组成，由式(2)得到

$$W = W_0 \exp\left\{ \frac{1}{2k_BT}\left[-\Delta T \Delta S + \Delta p \Delta V - \sum_{\gamma=1}^{k} \Delta \mu_r \Delta N_\gamma \right] \right\} \qquad (3)$$

它描述热力学量偏离统计平均值的概率分布。恰当地选择变量，可由式(3)计算各种热力学量的涨落。

闭系的热力学量涨落 thermodynamical quantities fluctuation of closed system 系统与媒质无物质交换，热力学量涨落的概率分布可表示为

$$W = W_0 \exp\left\{ \frac{1}{2k_BT}[-\Delta T \Delta S + \Delta p \Delta V] \right\} \qquad (1)$$

(1)选取体积 V 和温度 T 为自变量，则有

$$W(\Delta V, \Delta T) = W_0 \exp\left\{ -\frac{1}{2k_BT}\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T (\Delta V)^2 - \frac{C_V}{2k_BT}(\Delta T)^2 \right\}$$
$$= W(\Delta V) \cdot W(\Delta T) \qquad (2)$$

式(2)是以 ΔV 和 ΔT 为随机变量的联合分布，可求出

(a)体积的均方涨落和密度 $\rho = \frac{M}{V}$ 的相对涨落为

$$\langle (\Delta V)^2 \rangle = -k_BT\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T = k_BTV\kappa_T \qquad (3)$$

$$\sqrt{\frac{\langle (\Delta \rho)^2 \rangle}{\langle \rho \rangle^2}} = \sqrt{\frac{\langle (\Delta V)^2 \rangle}{\langle V \rangle^2}} = \sqrt{\frac{\kappa_T k_B T}{V}} \qquad (4)$$

式中 $\kappa_T = -\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ 是等温压缩系数。

(b)温度的均方涨落

$$\langle (\Delta T)^2 \rangle = k_BT^2 / C_V \qquad (5)$$

其中 C_V 为定体热容量。因均方涨落恒为正量，故有 $\kappa_T > 0$，$C_V > 0$。

(c)温度和体积的相关涨落

$$\langle \Delta T \Delta V \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta T \Delta V) W \mathrm{d}(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta V)}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} W \mathrm{d}(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta V)}$$
$$= \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta T) W(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta T)}{\int_{-\infty}^{\infty} W(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta T)} \cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\Delta V) W(\Delta V)\mathrm{d}(\Delta V)}{\int_{-\infty}^{\infty} W(\Delta V)\mathrm{d}(\Delta V)} = 0 \qquad (6)$$

式(6)表明，V 与 T 的涨落是彼此无关的。

(d)熵 S 和温度的相关涨落 利用式(5)、(6)得

$$\langle \Delta T \Delta S \rangle = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V \langle (\Delta T)^2 \rangle + \left(\frac{\partial S}{\partial V}\right)_T \langle \Delta T \Delta V \rangle$$
$$= \frac{C_V}{T}\frac{k_BT^2}{C_V} = k_BT \qquad (7)$$

可见，系统的熵和温度的涨落不是统计独立的。

(e)能量 E 的均方涨落 利用式(3)、(5)和(6)得

$$\langle (\Delta E)^2 \rangle = \left\langle \left[\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V \Delta T + \left(\frac{\partial E}{\partial V}\right)_T \Delta V \right] \right\rangle$$
$$= C_V k_B T^2 - k_BT\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T \cdot \left[T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V - p \right]^2 \qquad (8)$$

式中右端第一项是由于闭系与媒质作热交换而引起的能量涨落，第二项是闭系体积变化而对外作功所引起的能量涨落。

(2)选取压强 p 和熵 S 为自变量，则有

$$W(\Delta p, \Delta S) = W_0' \exp\left\{ \frac{1}{2k_BT}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S (\Delta p)^2 - \frac{1}{2k_BC_p}(\Delta S)^2 \right\}$$
$$= W(\Delta p) \cdot W(\Delta S) \qquad (9)$$

(a)熵的均方涨落

$$\langle (\Delta S)^2 \rangle = k_BC_p \qquad (10)$$

(b)压强的均方涨落

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = -k_BT\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S = \frac{k_BT}{V\kappa_S} \qquad (11)$$

式中 C_p 是定压热容，$\kappa_S=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S$ 为绝热压缩系数。显然有 $\kappa_S>0$，$C_p>0$。

(c)压强和熵的相关涨落

$$\langle\Delta p\Delta S\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta p\Delta S)W\mathrm{d}(\Delta p)\mathrm{d}(\Delta S)}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}W\mathrm{d}(\Delta p)\mathrm{d}(\Delta S)}$$
$$=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta p)W(\Delta p)\mathrm{d}(\Delta p)}{\int_{-\infty}^{\infty}W(\Delta p)\mathrm{d}(\Delta p)}\cdot\frac{\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta S)W(\Delta S)\mathrm{d}(\Delta S)}{\int_{-\infty}^{\infty}W(\Delta S)\mathrm{d}(\Delta S)}=0 \tag{12}$$

式(12)表明，S 和 p 的涨落是彼此无关的。

(d)压强和体积的相关涨落　利用式(11)和(12)得

$$\langle\Delta p\Delta V\rangle=\left(\frac{\partial V}{\partial S}\right)_p\langle\Delta S\Delta p\rangle+\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_S\langle(\Delta p)^2\rangle$$
$$=-k_BT \tag{13}$$

可见，系统的压强和体积的涨落不是统计独立的。

(e)焓 H 的均方涨落　利用式(10)、(11)和(12)即得

$$\langle(\Delta H)^2\rangle=\left\langle\left[\left(\frac{\partial H}{\partial S}\right)_p\Delta S+\left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_S\Delta p\right]^2\right\rangle$$
$$=k_BC_pT^2+\frac{k_BTV}{\kappa_S} \tag{14}$$

闭系的体积涨落　volume fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的温度涨落　temperature fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的熵涨落　entropy fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的压强涨落　pressure fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的熵和温度的相关涨落　correlation fluctuation of entropy and temperature for closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的压强和体积的相关涨落　correlation fluctuation of pressure and volume for closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的焓涨落　enthalpy fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

闭系的能量涨落　energy fluctuation of closed system　见“闭系的热力学量涨落”。

开系的粒子数涨落　particle number fluctuation of open system　对于温度和体积固定、且只含一种物质的开系，可利用公式 $W=W_0\cdot\exp\left\{-\frac{1}{2k_BT}\left(\frac{\partial\mu}{\partial N}\right)_{T,V}(\Delta N)^2\right\}$ 及 $\mathrm{d}\mu=-s\mathrm{d}T+v\mathrm{d}p$ 求得粒子数均方涨落

$$\langle(\Delta N)^2\rangle=k_BT\left(\frac{\partial N}{\partial\mu}\right)_{T,V}=\frac{N^2k_BT}{V}\kappa_T$$
$$\left[\kappa_T=-\frac{1}{v}\left(\frac{\partial v}{\partial p}\right)_T\text{为等温压缩系数}\right] \tag{1}$$

对于理想气体，粒子数的相对涨落 $\sqrt{\frac{\langle(\Delta N)^2\rangle}{\langle N\rangle^2}}=\sqrt{\frac{1}{\langle N\rangle}}$。

开系的能量涨落　energy fluctuation of open system　考虑开系的体积固定且只含有一种物质，于是热力学量涨落的概率分布公式为

$$W=W_0\exp\left\{\frac{1}{2k_BT}[-\Delta T\Delta S-\Delta\mu\Delta N]\right\} \tag{1}$$

若选取 T 和 N 为自变量，则有

$$W(\Delta T,\Delta N)=W_0\exp\left\{\frac{1}{2k_BT}\left[-C_V(\Delta T)^2-\left(\frac{\partial\mu}{\partial N}\right)_T(\Delta N)^2\right]\right\}$$
$$=W(\Delta T)\cdot W(\Delta N) \tag{2}$$

$$\langle(\Delta T)^2\rangle=\frac{k_BT}{C_V},$$

$$\langle(\Delta N)^2\rangle=k_BT\left(\frac{\partial N}{\partial\mu}\right)_T,$$

$$\langle\Delta T\Delta N\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta T\Delta N)W\mathrm{d}(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta N)}{\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}W\mathrm{d}(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta N)}$$
$$=\frac{\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta T)W(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta T)}{\int_{-\infty}^{\infty}W(\Delta T)\mathrm{d}(\Delta T)}$$

$$\cdot \frac{\int_{-\infty}^{\infty}(\Delta N)W(\Delta N)\mathrm{d}(\Delta N)}{\int_{-\infty}^{\infty}W(\Delta N)\mathrm{d}(\Delta N)} = 0 \tag{3}$$

利用式(3)即可求得能量的均方涨落

$$\langle(\Delta E)^2\rangle = \left\langle\left[\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N \Delta T + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T \Delta N\right]^2\right\rangle$$
$$= \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N^2 \langle(\Delta T)^2\rangle + 2\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_N \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T \cdot \langle\Delta T \Delta N\rangle + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T^2 \langle(\Delta N)^2\rangle$$
$$= k_B T C_V + \left(\frac{\partial E}{\partial N}\right)_T^2 k_B T \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_T \tag{4}$$

这个结果与用巨正则系综求得的能量涨落公式相同。

多参量涨落的一般公式 general formula of fluctuation for poly parameter 应用爱因斯坦涨落公式可以导出系统的多个热力学量对其平衡值偏离的概率分布

$$W(\{a_i\})\{\mathrm{d}a_i\} = \left[\frac{|\beta|}{(2k_B\pi)^n}\right]^{1/2} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2k_B}\sum_{i,j=1}^{n}\beta_{ij}a_i a_j\right]\{\mathrm{d}a_i\} \tag{1}$$

式中 $a_i = A_i - A_i^0 (i=1,2,\cdots,n)$ 为系统状态参量(广延量) A_i 对其平衡值 A_i^0 的偏离,$|\beta|$ 是 $n\times n$ 对称正定矩阵 β 的行列式,其元素为

$$\beta_{ij} = -\left(\frac{\partial^2 S}{\partial A_i \partial A_j}\right)_{a_i=a_j=0} \tag{2}$$

定义 $X_j = -\frac{\partial(\Delta S)}{\partial a_j}$,这里的 ΔS 是涨落过程中系统熵的变化。由式(1)可求得热力学量涨落的二次矩

$$\langle a_i X_j\rangle = k_B \delta_{ij}, \langle a_i a_l\rangle = k_B(\beta^{-1})_{il}, \langle X_l X_m\rangle = k_B \beta_{lm} \tag{3}$$

设 $\boldsymbol{h} = (h_1,\cdots,h_n)$ 为一 n 维矢量,可得到一般积分式:

$$\left[\frac{|\beta|}{(2k_B\pi)^n}\right]^{1/2}\int\cdots\int \mathrm{d}a_1\cdots\mathrm{d}a_n \exp\left[-\frac{1}{2k_B}\sum_{i,j}\beta_{ij}a_i a_j + \boldsymbol{h}\cdot\boldsymbol{a}\right] = \exp\left[\frac{k_B}{2}\sum_{i,j}(\beta^{-1})_{ij}h_i h_j\right] \tag{4}$$

利用式(4)能方便地算出高次矩,得出维克(Wick)定理:

$$\langle a_1 a_2 a_3 a_4\rangle = C\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\boldsymbol{a}(a_1 a_2 a_3 a_4)\exp\left[\frac{-1}{2k_B}\sum_{i,j}\beta_{ij}a_i a_j\right]$$
$$= \lim_{\boldsymbol{h}\to 0}\frac{\partial}{\partial h_1}\frac{\partial}{\partial h_2}\frac{\partial}{\partial h_3}\frac{\partial}{\partial h_4}\left\{\exp\left[\frac{k_B}{2}\sum_{i,j}(\beta^{-1})_{ij}h_i h_j\right]\right\}$$
$$= \langle a_2 a_3\rangle\langle a_1 a_4\rangle + \langle a_2 a_4\rangle\langle a_1 a_3\rangle + \langle a_3 a_4\rangle\langle a_1 a_2\rangle \tag{5}$$

散射光强度公式 scattered light intensity formula 当光束通过不均匀媒质时,一部分光将向四周散开,从侧面可看到光束,这种现象称为光的散射。这是由于媒质分子热运动导致密度涨落形成媒质的不均匀性而引起的。瑞利(Rayleigh)证明,当波长为 λ 通过单位面积的强度为 1 的光射到体积比 λ^3 小的媒质上时,单位体积媒质在垂直于入射光方向单位立体角内散射的光强度为

$$\frac{I}{V} = \frac{2\pi^2 V}{\lambda^4}\left(\frac{\Delta n}{n}\right)^2 \tag{1}$$

式中 Δn 是折射率 n 的偏离。利用洛伦兹(Lorentz)的折射公式 $\frac{1}{\rho}\frac{n^2-1}{n^2+2}=$ 常数,及密度 ρ 的涨落公式,式(1)变为

$$\frac{I}{V} = \frac{\pi^2 V(n^2-1)^2(n^2+2)^2}{18n^4\lambda^4}\frac{k_B T}{V}\kappa_T \tag{2}$$

可见,压缩系数 κ_T 愈大,波长愈短,散射就愈强。因此晴天时,太阳光中的蓝光散射很多,而波长更短的紫色光却被大气吸收很多,因此,天空呈蔚蓝色。日出和日落时,太阳光通过很厚的大气层后,呈橙红色。

瑞利光散射公式 Rayleigh formula of light scatter 见“散射光强度公式”。

临界乳光现象 critical opalescence phenomena 单位体积媒质在垂直于入射光方向单位立体角内散射的光强度为

$$\frac{I}{V}=\frac{\pi^2 V(n^2-1)^2(n^2+2)^2}{18n^4\lambda^4}\cdot\left[-\frac{k_BT}{V^2}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T\right]$$
$$=\frac{\pi^2 V(n^2-1)^2(n^2+2)^2}{18n^4\lambda^4}\frac{k_BT}{V}\kappa_T \qquad (1)$$

在临界点附近 $\kappa_T=-\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_T$ 值较大，将 $\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T$ 在临界点附近按小量 $(T-T_c)$ 和 $(V-V_c)$ 展开，利用临界态的特点：$\left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T=0$，$\left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2}\right)_T=0$，$\left(\frac{\partial^3 p}{\partial V^3}\right)_T<0$，由式(1)即可得出

$$\frac{I}{V}\propto\frac{1}{T-T_c} \qquad (2)$$

式(2)表明，临界点附近散射光强度与 $(T-T_c)$ 成反比。在临界点的涨落要比通常情况下的涨落强 $\sqrt{N}$ 倍。于是，这种状态下的涨落造成强烈散射效应，物质呈现乳浊现象，称为临界乳光。

临界涨落 critical fluctuation 见“临界乳光现象”。

相关函数 correlation function 描述系统的物理量在空间两点或两个时刻涨落的相互关联的函数。前者称为空间相关函数，后者称为时间相关函数。以 $\Delta A(\boldsymbol{r})=A(\boldsymbol{r})-\langle A(\boldsymbol{r})\rangle$ 和 $\Delta A(\boldsymbol{r}')$ 分别表示物理量 A 在 $\boldsymbol{r}$ 处和 $\boldsymbol{r}'$ 处的涨落，则

$$\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta A(\boldsymbol{r}')\rangle=K_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \qquad (1)$$

表示空间相关函数，而

$$\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta B(\boldsymbol{r}')\rangle=K_{AB}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \qquad (2)$$

则称为交叉空间相关函数。时间相关函数和交叉时间相关函数分别表示为

$$\langle A(t)A(t')\rangle=\Phi_{AA}(t,t') \qquad (3)$$
$$\langle A(t)B(t')\rangle=\Phi_{AB}(t,t') \qquad (4)$$

布朗运动是与时间相关函数密切相联的典型例子。

时间相关函数 time correlation function 见“相关函数”。

空间相关函数 space correlation function 处于平衡态的系统，由于粒子间存在相互作用，不同粒子的相对位置之间就一定存在相关性，物理量 A 在空间不同的两点的涨落 $\Delta A(\boldsymbol{r})$ 和 $\Delta A(\boldsymbol{r}')$ 相互关联着。定义空间相关函数

$$\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta A(\boldsymbol{r}')\rangle$$
$$=\langle(A(\boldsymbol{r})-\langle A(\boldsymbol{r})\rangle)(A(\boldsymbol{r}')-\langle A(\boldsymbol{r}')\rangle)\rangle$$
$$=K_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \qquad (1)$$

$K_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 描述某处的涨落和邻近另一处涨落的相互联系，其大小决定了涨落的关联程度，在有些情况下，它描述外界在空间某点的扰动对空间另一点的影响，给出原因和结果在空间上的联系。式中 $\langle\cdots\rangle$ 表示系综的平均值。$A(\boldsymbol{r})$ 可以是粒子数密度 $n(\boldsymbol{r})$、能量密度 $E(\boldsymbol{r})$，也可以是磁矩密度在 z 方向的投影 $M_z(\boldsymbol{r})$ 等。若 $\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{r}'$ 两处的涨落是相互统计独立的，则

$$\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta A(\boldsymbol{r}')\rangle=\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\rangle\cdot\langle\Delta A(\boldsymbol{r}')\rangle$$
$$=0\quad(\boldsymbol{r}\neq\boldsymbol{r}') \qquad (2)$$

在均匀系统中，相关函数只是位矢差的函数：

$$K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=K(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \qquad (3)$$

称之为空间平移不变性原理。K 的值随两点间距离 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ 的增大而减小，当距离无限增大时，相关性一定消失。若在 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx\xi$ 内，相关函数随 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ 变化很大，相关性显著，但在 ξ 以外，相关性很弱甚至可以略去，则称 ξ 为相关长度，它可作为空间相关性范围的一种量度。若物理量在空间任何两点都不相关，这相当于 ξ 为 0 的情形。此时相关函数应为

$$\langle\Delta A(\boldsymbol{r})\Delta A(\boldsymbol{r}')\rangle=K_{AA}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$$
$$=a\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),$$
$$a=\langle(\Delta A(\boldsymbol{r}))^2\rangle \qquad (4)$$

涨落的空间相关性可分为两类：一类是粒子间存在相互作用，使得空间各处相互牵连，叫做动力学相关性，经典理想气体不存在空间相关性。另一类是由于微观粒子的全同性而产生的量子效应的相关性，称为统计相关性。对于量子理想气体，存在空间相关性，理想费米气

体具有排斥相关性,理想玻色气体具有吸引相关性。两者之间往往是相互联系、相互影响的。不能把它们截然分开。空间相关函数是一个重要的量,利用它可以求出系统的各个热力学量。

空间平移不变性原理 principle of spatial displacement invariance 见"空间相关函数"。

统计独立 statistical independent 见"空间相关函数"。

相关长度 correlation length 见"空间相关函数"。

动力学相关和统计相关 dynamical correlation and statistical correlation 见"空间相关函数"。

粒子数密度涨落的空间相关 space correlation of particle number density fluctuation 空间两点相关性的强弱决定于两点在概率上的关联程度。考虑无外场存在的均匀系统。将正则系综的分布函数对所有粒子的动量进行积分,其结果即为位形分布函数 $R^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$,它是 N 个粒子的位置分别处在 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N$ 的概率密度,且满足归一化条件。粒子数密度在 $\boldsymbol{r}$ 处的值可表示为

$$n(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \tag{1}$$

其意义是当粒子 j 的位置 $\boldsymbol{r}_j$ 进入 $\boldsymbol{r}$ 处的一个无限小体元时,对 $\boldsymbol{r}$ 处粒子数密度的贡献为1,由于 R^N 为粒子坐标的对称函数,所以式(1)中求和号内的每一项的贡献均相同。$n(\boldsymbol{r})$ 的系综平均值应为

$$\begin{aligned}\langle n(\boldsymbol{r})\rangle &= \int\cdots\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N n(\boldsymbol{r})R^N(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\\ &= N\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\int\cdots\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N R^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\\ &= R_1(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{2}$$

其中引入了单粒子分布函数 R_1,其定义是

$$R_1(\boldsymbol{r}_1) = N\int R^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \tag{3}$$

显然有 $\int R_1(\boldsymbol{r}_1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1 = N$,可见 $R_1(\boldsymbol{r}_1)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1$ 表示 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1$ 中可能出现的分子数,于是

$$R_1(\boldsymbol{r}_1) = R_1(\boldsymbol{r}) = n \quad (\text{对于均匀系}) \tag{4}$$

注意到 $\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_j) = \sum_{i=j=1}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_j) + \sum_{i\neq j}^{N}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_j) = N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_1) + N(N-1)\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2)$,可得

$$\langle n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')\rangle = n\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') + R_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \tag{5}$$

式中 $R_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 称为二粒子分布函数,定义为

$$R_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = N(N-1)\cdot\int\cdots\int R^N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\mathrm{d}\boldsymbol{r}_3\cdots\mathrm{d}\boldsymbol{r}_N \tag{6}$$

利用式(5),即可得到粒子数密度涨落的空间相关函数

$$\begin{aligned}\langle\Delta n(\boldsymbol{r})\Delta n(\boldsymbol{r}')\rangle &= \langle n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')\rangle - n^2\\ &= n\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') + R_2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') - n^2\end{aligned} \tag{7}$$

若知道了二粒子分布函数 R_2,即可求得涨落相关函数。

单粒子和二粒子分布函数 distribution function of monparticle and two-particle 见"粒子数密度涨落的空间相关性"。

粒子数密度涨落的空间相关函数 space correlation function of particle number density fluctuation 见"粒子数密度涨落的空间相关性"。

非均匀系的空间相关函数 space correlation function of nonhomogeneous system 由于外场如磁场或"化学势场"或"温度场"的引入,系统变得不均匀,若改变外场,会使系统的概率分布函数发生变化,从而导致平均磁矩密度或平均粒子数密度或平均能量密度的改变,可导出某些用涨落相关函数表示的热力学量的导数的关系式。

考虑引入的外场为一沿 z 轴的磁场 $B_z(\boldsymbol{r})$,当 $B_z(\boldsymbol{r}')$ 变为 $B_z(\boldsymbol{r}') + \delta B_z(\boldsymbol{r}')$($\delta B_z(\boldsymbol{r}')$ 为一小量)时,平均磁矩密度 $\langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle$ 变为 $\langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle + \delta\langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle$,平均能量密度 $\langle E(\boldsymbol{r})\rangle$ 变为 $\langle E(\boldsymbol{r})\rangle + \delta\langle E(\boldsymbol{r})\rangle$,平均值的改变量则分别为

$$\delta\langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle = \frac{1}{k_B T}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta B_z(\boldsymbol{r}'),$$

$$g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle \Delta M_z(\boldsymbol{r})\Delta M_z(\boldsymbol{r}')\rangle \quad (1)$$

$$\delta\langle E(\boldsymbol{r})\rangle = \frac{1}{k_B T}\int d\boldsymbol{r}' g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\delta B_z(\boldsymbol{r}'),$$

$$g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \langle \Delta E(\boldsymbol{r})\Delta M_z(\boldsymbol{r}')\rangle \quad (2)$$

式中 $\Delta M_z(\boldsymbol{r}) = M_z(\boldsymbol{r}) - \langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle$，$\Delta E(\boldsymbol{r}) = E(\boldsymbol{r}) - \langle E(\boldsymbol{r})\rangle$，$g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 是磁矩密度涨落相关函数，$g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 为能量密度-磁矩密度涨落交叉相关函数。若外场只在 $\boldsymbol{r}_1$ 处有一微变化 $\delta B_z(\boldsymbol{r}') = \delta B_z(\boldsymbol{r}_1)\delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_1)$，则有

$$\delta\langle M(\boldsymbol{r})\rangle / \delta B_z(\boldsymbol{r}_1) = \frac{1}{k_B T} g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) \quad (3)$$

$$\delta\langle E(\boldsymbol{r})\rangle / \delta B_z(\boldsymbol{r}_1) = \frac{1}{k_B T} g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) \quad (4)$$

式(3)和(4)表明，$g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)$、$g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)$ 分别描述 $\boldsymbol{r}_1$ 处磁场的变化对 $\boldsymbol{r}$ 处的磁化强度和平均能量密度产生的影响。若磁场的变化是一常量 $\delta B_z(\boldsymbol{r}') = \delta B_z$，可以得出

$$\chi = \left(\frac{\delta\langle M_z(\boldsymbol{r})\rangle}{\delta B_z}\right)_T = \frac{\partial \overline{M}_z}{\partial B_z}$$

$$= \frac{1}{k_B T}\int g_{MM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \quad (5)$$

$$\left(\frac{\delta\langle E(\boldsymbol{r})\rangle}{\delta B_z}\right)_T = \left(\frac{\partial \overline{E}}{\partial B_z}\right)_T$$

$$= \frac{1}{k_B T}\int g_{EM}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \quad (6)$$

由于磁化率 χ 应大于零，故(5)式中积分也大于零，如果积分发散，将出现临界态。

如果引入的外场是“化学势场”$\mu(\boldsymbol{r})$ 或“温度场”$\beta(\boldsymbol{r}) = \dfrac{1}{k_B T(\boldsymbol{r})}$，且当 $\mu(\boldsymbol{r}')$ 变为 $\mu(\boldsymbol{r}') + \delta\mu(\boldsymbol{r}')$ 或当空间每一宏观足够小微观足够大的体元的 β 变为 $\beta(\boldsymbol{r}') = \beta + \delta\beta(\boldsymbol{r}')$ 时，则可得到与式(1)、(3)和(5)完全类似的关系式，相应的相关函数是粒子数密度涨落相关函数 $g_{nn}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 和能量密度涨落相关函数，它们分别描述 $\boldsymbol{r}'$ 处化学势的变化对 $\boldsymbol{r}$ 处的平均粒子数密度和 $\boldsymbol{r}'$ 处温度变化对 $\boldsymbol{r}$ 处平均能量密度所产生的影响。

流体系统在临界点附近的密度涨落与相关 density fluctuation and correlation of fluid system near critical point 在气-液二级相变的临界点有反常大的密度涨落。定义流体系统粒子数密度相关函数

$$\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \equiv \langle (n(\boldsymbol{r}) - \langle n(\boldsymbol{r})\rangle) \cdot (n(\boldsymbol{r}') - \langle n(\boldsymbol{r}')\rangle)\rangle$$

$$= \langle \Delta n(\boldsymbol{r})\Delta n(\boldsymbol{r}')\rangle \quad (1)$$

其中 $\Delta n(\boldsymbol{r})$ 代表 $\boldsymbol{r}$ 点的数密度、随机变量 $n(\boldsymbol{r})$ 对其平均值的偏离，显然 $\langle \Delta n(\boldsymbol{r})\rangle = \langle n(\boldsymbol{r}) - \langle n(\boldsymbol{r})\rangle\rangle = 0$，考虑均匀流体遵从平移不变性原理，$\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \Phi(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$，并将 $n(\boldsymbol{r}) - \langle n\rangle$ 作傅里叶展开，其波矢为 $\boldsymbol{k}$ 的傅氏分量为 $n_{\boldsymbol{k}}$，则有

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \langle (n(\boldsymbol{r}) - \langle n\rangle)(n(0) - \langle n\rangle)\rangle$$

$$= \frac{1}{V^2}\sum_{\boldsymbol{k}} \langle |n_{\boldsymbol{k}}|^2\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \quad (2)$$

式中 V 是系统的体积。应用爱因斯坦涨落公式并将自由能密度 f 对其平均值的偏离按 $n - \langle n\rangle$ 的幂次展开，即 $\Delta f = f - \langle f\rangle = \dfrac{a}{2}(n - \langle n\rangle)^2 + \dfrac{b}{2}(\nabla n)^2$，这里系数 a 与密度无关，但依赖于温度，常数 $b > 0$，由于在临界点有 $\left(\dfrac{\partial p}{\partial n}\right)_T = 0$，故 $a = \left(\dfrac{\partial^2 f}{\partial n^2}\right)_T = \dfrac{1}{n}\left(\dfrac{\partial p}{\partial n}\right)_T$ 在临界点为零。朗道(Landau)取 $a = a_0(T - T_c)$，a_0 是一与 T 无关的常数。可以算出

$$\Phi(\boldsymbol{r}) = \frac{k_B T}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{a + bk^2} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\Phi(r) = \frac{k_B T}{4\pi b}\frac{1}{r}e^{-r/\xi}, \quad \xi = \left(\frac{b}{a}\right)^{1/2} \quad (3)$$

它描述密度涨落在空间两点(相距 r)的关联，ξ 是表征空间相关的特征长度，称为相关长度。由于 $a \propto T - T_C$，故 $\xi \propto (T - T_C)^{-1/2}$，当 $T \to T_C$(临界温度)时，$\xi \to \infty$，可见，临界点附近一些热力学量发散与相关长度趋于∞是一回事。显然，当 $T \to T_C$ 时，$\Phi(r)$ 变为

$$\Phi(r) = \frac{k_B T}{4\pi br} \quad (4)$$

表明在临界点附近很大范围内，$\Phi(r)$ 变化行为如 r^{-1}。

铁磁系统在临界点附近自旋密度的涨落与

相关 spin density fluctuation and correlation of ferromagnetic system near critical point 在临界点邻域可用中子束探测出小尺度范围内(远小于样品线度)的自旋涨落。定义自旋密度

$$s(\boldsymbol{r}) \equiv \sum s_i/\Delta V \quad (i \in \Delta V),$$

ΔV:小体元 (1)

可采用与流体密度的涨落与相关完全类似的方法进行讨论。只需注意对应关系:$n(\boldsymbol{r}) \to s(\boldsymbol{r})$,$\langle n\rangle \to \langle s\rangle$。自旋密度相关函数定义为

$$\begin{aligned}\Phi_{ss}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &\equiv \langle (s(\boldsymbol{r})-\langle s(\boldsymbol{r})\rangle) \\ &\quad \cdot (s(\boldsymbol{r}')-\langle s(\boldsymbol{r}')\rangle)\rangle \\ &= \langle \Delta s(\boldsymbol{r})\Delta s(\boldsymbol{r}')\rangle \end{aligned} \quad (2)$$

对于均匀系统,由于平移不变性,$\Phi_{ss}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\Phi_{ss}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$,则有

$$\begin{aligned}&\Phi_{ss}(\boldsymbol{r})=\langle (s(\boldsymbol{r})-\langle s\rangle)(s(0)-\langle s\rangle)\rangle, \\ &\langle s(\boldsymbol{r})\rangle=\langle s(0)\rangle=\langle s\rangle \end{aligned} \quad (3)$$

将 $\Delta s(\boldsymbol{r})$ 展成傅里叶级数,应用爱因斯坦涨落公式,并把自由能密度 f 对其平均值的偏离 $\Delta f=f-\langle f\rangle$ 按 $s-\langle s\rangle$ 的幂次展开,可以求得

$$\Phi_{ss}(\boldsymbol{r}) = \frac{k_BT}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{a+bk^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

或

$$\Phi(r)=\frac{k_BT}{4\pi b}\frac{1}{r}e^{-r/\xi}, \xi=\sqrt{\frac{b}{a}} \quad (4)$$

其中 a 和 b 均为 Δf 展开式中的系数,a 与温度有关,b 是一正常数,$\Phi(r)$ 描述自旋密度在空间相距 r 的两点的关联。相关长度 $\xi \propto (T-T_C)^{-1/2}$ 是表征空间关联的特征长度,当 $T \to T_C$ 时,$\xi \to \infty$,而 $\Phi(r)$ 变为

$$\Phi(r)=\frac{k_BT}{4\pi br} \quad (5)$$

布朗运动 Brownian movement 1827 年植物学家布朗发现悬浮在处于给定温度的液体介质中的物质(例如花粉)微粒作不停息的无规运动,这种微小粒子即布朗粒子的运动称为布朗运动。1905 年爱因斯坦采用无规荡步模型和扩散方程对布朗运动给出定量的描述和正确的结论。1908 年佩兰从实验上证实了爱因斯坦理论的正确性。后经朗之万、福克、普朗克等人的工作,建立了比较完整的布朗运动理论体系,它给研究微观粒子的随机运动以及在许多领域的应用提供了重要的理论依据和有效的手段。

(1)爱因斯坦理论 考虑单个布朗粒子的一维运动。以 $x(t)$ 表示粒子 t 时刻的位置,令 $x(0)=0$。设粒子平均每隔 Δt 时间跳跃一长为 l 的距离,且沿 x 轴正向与负向跳跃的几率分别为 $p=\frac{1}{2}$ 和 $q=\frac{1}{2}$。那么,粒子共跳跃 N 次中 n 次作正向跳跃的几率为

$$p_N(n)=\frac{N!}{n!(N-n)!}p^nq^{N-n} \quad (1)$$

即二项式分布,$p_N(n)$ 是归一化的。可求出 $t \gg \Delta t$ 时微粒净位移的一次矩及二次矩分别是

$$\overline{x(t)}=0, \overline{x^2(t)}=\frac{t}{\Delta t}l^2 \quad (2)$$

式(2)表明,布朗粒子的均方位移与时间 t 一次方成正比,这是随机过程的特征。爱因斯坦将布朗粒子的运动与扩散过程联系起来。在 t 时刻、x 处的粒子数遵从扩散方程

$$\frac{\partial n}{\partial t}=D\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} \quad (3)$$

其中 D 是扩散系数。由式(3)的解可找出微粒落在 $x \sim x+dx$ 的概率:

$$\begin{aligned}p(x)dx &= \frac{n(x,t)}{N}dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)dx \end{aligned} \quad (4)$$

将式(4)与应用斯特林公式使式(1)化简后的 $p_N(n)$ 表示式等同起来,并注意到式(3),求得

$$\overline{x^2}=2Dt \quad (5)$$

将布朗粒子看做理想气体,一个微粒受到的作用力为 $f_1=-\frac{1}{n}\frac{dn}{dx}k_BT$,另一方面,它在黏性系数为 η 的流体中所受的阻力遵从斯托克斯定律 $f=6\pi\eta av$,平衡时有 $f=f_1$,且有 $nv=-D\frac{dn}{dx}$,因此得到

$$D=k_BT/6\pi a\eta \quad (6)$$

式(6)称为爱因斯坦关系,式中 a 是粒子的半径。

(2)佩兰实验 佩兰(Perrin)将显微镜聚焦在不同的水平面上,测得不同高度的微粒浓度 n,观测结果证实了微粒按高度分布的玻尔兹

曼分布律。他从实验上测定的微粒的密度 ρ、平均半径 a 和质量 m 等数据算出玻尔兹曼常数 k_B 及阿伏加德罗常数 N_A。他还跟踪一个微粒，每隔 Δt 时间测量一次位移 Δx_i，共测 N 次，得到位移均方值 $\overline{x^2}=\sum_{i,j=1}^{N}\overline{\Delta X_i\Delta X_j}=\sum_{i=1}^{N}\overline{(\Delta X_i)^2}=N(\Delta x)^2$，例如对半径为 0.212×10^{-6}m 的藤黄树脂微粒沿 x 轴的均方位移测得的一组数据：

Δt(s)	30	60	90	120
$\overline{x^2}(10^{-12}\text{m}^2)$	45	86.5	140	195

多次实验证明 $\overline{(\Delta x)^2}=\dfrac{RT}{3\pi\eta aN_A}\Delta t$，此结果与式(5)和(6)完全相符。他还从实验上证实了式(4)的正确性。

布朗粒子 Brownian particle　见“布朗运动”。

布朗粒子的均方位移 mean square displacement of Brownian particle　见“布朗运动”。

布朗粒子的空间概率分布 space probability distribution of Brownian particle　见“布朗运动”。

布朗运动的扩散方程 diffusion equation of Brownian movement　见“布朗运动”。

佩兰布朗运动实验 Perrin experiment of Brownian movement　见“布朗运动”。

朗之万方程 Langevin equation　布朗粒子运动方程的一般形式。质量为 m 的布朗粒子运动遵从下述朗之万方程

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\int_{-\infty}^{t}\gamma(t-t')\boldsymbol{v}(t')\mathrm{d}t'+\boldsymbol{F}(t)+\boldsymbol{K}(t)\qquad(1)$$

右端第1项是液体的黏滞阻力(有规部分)，它有记忆效应，黏性系数 $\gamma(t-t')$ 不是常数；第2项是周围液体分子碰撞产生的涨落力(无规部分)，$\boldsymbol{F}(t)$ 是一个涨落不定的快速变化的力，其平均值为零：$\langle\boldsymbol{F}(t)\rangle=0$；第3项 $\boldsymbol{K}(t)$ 是外力。设 $\boldsymbol{K}(t)=0$，$\gamma(t-t')=\gamma=$ 常数，则式(1)变为

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\gamma\boldsymbol{v}+\boldsymbol{F}(t)\qquad(2)$$

将式(2)两端取平均，显然有

$$\frac{\mathrm{d}\langle\boldsymbol{v}\rangle}{\mathrm{d}t}=-\frac{\gamma}{m}\langle\boldsymbol{v}\rangle,$$

$$\langle\boldsymbol{v}(t)\rangle=\boldsymbol{v}(0)\mathrm{e}^{-t/\tau}\qquad(3)$$

式中 $\boldsymbol{v}(0)$ 是积分常数。$\boldsymbol{v}(t)$ 又称为微粒的平均漂移速度，它随时间作指数衰减，式(3)中

$$\tau=m/\gamma\qquad(4)$$

决定平均速度随时间衰减快慢的程度，称为布朗运动的弛豫时间。注意到 $\boldsymbol{v}=\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}$，可由式(2)得出

$$\frac{\mathrm{d}^2\langle r^2\rangle}{\mathrm{d}t^2}+\frac{1}{\tau}\frac{\mathrm{d}\langle r^2\rangle}{\mathrm{d}t}=2\langle v^2\rangle+\frac{2}{m}\langle\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{F}\rangle=6k_BT/m\qquad(5)$$

其中应用了能量均分原理及 $\langle\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{F}\rangle=0$。利用初始条件 $\langle r^2\rangle\Big|_{t=0}=0$，$\dfrac{\mathrm{d}\langle r^2\rangle}{\mathrm{d}t}\Big|_{t=0}=0$，即得微粒的均方位移表达式即式(5)的解

$$\langle r^2\rangle=\frac{6k_BT}{m}\tau^2\left[\frac{t}{\tau}-(1-\mathrm{e}^{-t/\tau})\right]\qquad(6)$$

微粒按式(7)的规律运动。当 $t\ll\tau$ 时，得到与自由质点运动相同关系

$$\langle r^2\rangle\approx\frac{3k_BT}{m}t^2=\langle v^2\rangle t^2\qquad(7)$$

粒子以不变的速度运动，因而具有可逆性，原因在于此时微粒运动并未受到液体黏滞阻力的作用，能量没有耗散；当 $t\gg\tau$ 时，则有

$$\langle r^2\rangle\approx\frac{6k_BT}{m}\tau t=\frac{6k_BT}{\gamma}t\qquad(8)$$

微粒进行扩散过程，它具有耗散性和不可逆性，式(8)已为实验证实。由爱因斯坦关于一维布朗运动的均方位移公式 $\overline{x^2}=2Dt$，即得著名的爱因斯坦关系

$$D=k_BT/\gamma\quad(D\text{:扩散系数})\qquad(9)$$

它给出扩散过程与黏滞性的联系是涨落耗散定理的雏形。

涨落力 fluctuation force　见“朗之万方程”。

布朗粒子的平均漂移速度 average drift velocity of Brownian particle　见“朗之万方程”。

布朗运动的弛豫时间 relaxation time of Brownian movement　见“朗之万方程”。

布朗粒子均方位移的一般表示式 general

expression of mean square displacement of Brownian particle 见“朗之万方程”。

爱因斯坦关系 Einstein relation 见“朗之万方程”。

布朗粒子速度相关函数 velocity correlation function of Brownian particle 考虑布朗粒子的速度遵从一维朗之万方程。

$$m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=-\gamma v+F(t) \qquad (1)$$

式中涨落力 $F(t)$ 是一随机变量,具有如下性质:(1)当 $t>0$ 时,$\langle F(t)\rangle=0$;(2)相关函数可表示为 $\langle F(t)F(t')\rangle=2g\delta(t-t')$,$g$ 是一常数,反映两个不同时刻 $F(t)$ 是不相关的。式(1)的解可写做

$$v=v_0\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}t}+\frac{1}{m}\int_0^t\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t-\xi)}F(\xi)\mathrm{d}\xi \qquad (2)$$

利用式(2)和性质(2),求得微粒速度相关函数为

$$\begin{aligned}&\langle v(t)v(t')\rangle\\&=v_0^2\mathrm{e}^{-\frac{\gamma}{m}(t+t')}+\int_0^t\mathrm{d}\xi\mathrm{e}^{-(t-\xi)/\tau}\\&\cdot\int_0^{t'}\mathrm{e}^{-(t'-\xi')/\tau}\frac{\langle F(\xi)F(\xi')\rangle}{m^2}\mathrm{d}\xi'\\&=\frac{\tau g}{m^2}\mathrm{e}^{-|t-t'|/\tau}+\left(v_0^2-\frac{\tau g}{m^2}\right)\mathrm{e}^{-(t+t')/\tau} \qquad (3)\end{aligned}$$

其中 $\tau=\frac{m}{\gamma}$ 是弛豫时间,v_0 是初速,左端是对系综的平均,式(3)表示微粒的速度在两个不同时刻的关联性。当 t 与 t' 之差大于 τ 时,相关函数变得很小,以致趋于零,变得不关联了。当 $t=t'$ 时,则有

$$\langle v^2(t)\rangle=\frac{\tau g}{m^2}+\left(v_0^2-\frac{\tau g}{m^2}\right)\mathrm{e}^{-2t/\tau} \qquad (4)$$

式(4)表明,对于 $t\ll\frac{m}{2\gamma}=\frac{\tau}{2}$,速度的涨落决定于 v_0,当 t 较大时,速度的均方值趋近于 $\frac{\tau g}{m^2}$,这决定于碰撞机制。经过长时间后趋于平衡,服从能量均分原理,故有

$$\begin{aligned}\langle F(t)F(t')\rangle&=2g\delta(t-t')\\&=2k_BT\gamma\delta(t-t') \qquad (5)\end{aligned}$$

以 $v(\omega)$ 表示微粒速度 $v(t)$ 的傅氏分量,则有

$$v(t)=\int_{-\infty}^{\infty}v(\omega)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega,$$

$$v(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}v(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t \qquad (6)$$

因 $v(t)$ 是实量,故 $v(-\omega)=v^*(\omega)$。若涨落力 $F(t)$ 的傅氏分量为 $F(\omega)$,也有类似于式(6)的关系式,于是得到:

$$v(\omega)=\frac{F(\omega)}{\gamma-\mathrm{i}m\omega},$$

$$\langle|v(\omega)|^2\rangle=\frac{\langle|F(\omega)|^2\rangle}{\gamma^2+m^2\omega^2} \qquad (7)$$

$$\begin{aligned}&\langle F(\omega)F(\omega')\rangle\\&=\frac{2k_BT\gamma}{(2\pi)^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t+\mathrm{i}\omega' t'}\delta(t-t')\\&=\frac{\gamma k_BT}{\pi}\delta(\omega+\omega') \qquad (8)\end{aligned}$$

$$\langle F(\omega)F^*(\omega')\rangle=\frac{1}{\pi}\gamma k_BT\delta(\omega-\omega')$$

或

$$\langle F(\omega)F(-\omega')\rangle=\frac{1}{\pi}\gamma k_BT\delta(\omega-\omega') \qquad (9)$$

求得涨落力相关函数和速度相关函数的谱密度为

$$\langle|F(\omega)|^2\rangle=\frac{1}{\pi}\gamma k_BT \qquad (10)$$

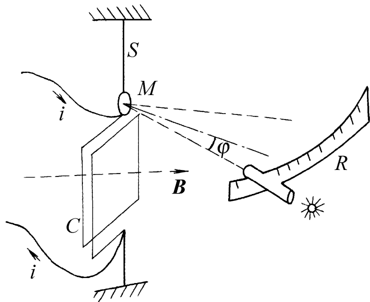
$$\begin{aligned}\langle|v(\omega)|^2\rangle&=\frac{\langle|F(\omega)|^2\rangle}{\gamma^2+m^2\omega^2}\\&=\frac{1}{\pi}\frac{\gamma k_BT}{\gamma^2+m^2\omega^2} \qquad (11)\end{aligned}$$

布朗粒子的均方速度 mean square velocity of Brownian partical 见“布朗粒子速度相关函数”。

涨落力相关函数及其谱密度 correlation function and its spectral density for fluctuation force 见“布朗粒子速度相关函数”。

布朗粒子速度相关函数的谱密度 spectral density of velocity correlation function for Brownian particle 见“布朗粒子速度相关函数”。

悬圈电流计偏转角的均方根涨落 root-mean-square fluctuation of deflection angle of suspended coil galvanometer 是朗之万方程应用的一个例子。电流计装置如下图所示。用弹性悬线 S 稳定线圈 C 的位置,当 C 中有被测电流通过时,则它在恒定磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用下发生偏转,由反射镜 M 落在标尺 R 上的光点测



出偏转角 φ,其一维运动方程与布朗粒子运动方程相似：

$$I\frac{d^2\varphi}{dt^2}+\gamma\frac{d\varphi}{dt}+a\varphi=L(t) \qquad (1)$$

式中 I 是线圈系统的转动惯量，a 是悬线的扭转系数，γ 是空气阻力系数，$L(t)$为涨落力矩。将 M 和 C 看做布朗粒子,根据能量均分原理,则有

$$\frac{1}{2}\overline{I\left(\frac{d\varphi}{dt}\right)^2}=\frac{1}{2}\overline{a\varphi^2}=\frac{1}{2}k_BT \qquad (2)$$

由此可得到偏转角的均方根涨落为

$$\sqrt{\overline{\varphi^2}}=\sqrt{\frac{k_BT}{a}} \qquad (3)$$

若电流 i 引起的偏转角小于此值时,则无法测出,故式(3)中涨落量就是电流计灵敏度的量度。对于石英的悬线，$a=10^{-13}\text{N}\cdot\text{m}\cdot\text{rad}^{-2}$, $T=291\text{K}$,可以算出 $\sqrt{\overline{\varphi^2}}=2\times10^{-4}\text{rad}$,rad 是弧度。

***R-L* 电路的热噪声　thermal noise of *R-L* electric circuit**　电路中由于电子在导体中的热运动,产生热噪声,这种现象与布朗运动非常相似。含电阻 R、电感 L 和电容 C 的电路中的热噪声电流 I 遵从下列方程

$$L\frac{dI}{dt}+RI+\frac{q}{C}=V(t) \qquad (1)$$

式中 $V(t)$为热噪声电压或电压涨落,先不考虑电容,让 $C=\infty$,则式(1)变为与布朗粒子遵从的一维朗之万方程 $m\frac{dv}{dt}+\gamma v=F(t)$完全类似的形式

$$L\frac{dI}{dt}+RI=V(t) \qquad (2)$$

于是可将它们相当的量一一对应起来：$m\leftrightarrow L$, $\gamma\leftrightarrow R$, $v\leftrightarrow I$, $F(t)\leftrightarrow V(t)$,而布朗粒子的均方位移$\langle r^2\rangle$则与均方电量涨落$\langle(\Delta q)^2\rangle$对应。可以假定(1)当 $t>0$ 时，$\langle V(t)\rangle=0$;(2)$\langle V(t)V(t')\rangle=2ARL\delta(t-t')$。于是可写出

(1)平均热噪声电流

$$\langle I(t)\rangle=I_0e^{-t/\tau}\quad (I_0:\text{初始值}) \qquad (3)$$

其中 $\tau=\frac{L}{R}$为弛豫时间,它决定$\langle I(t)\rangle$随 t 衰减快慢的程度。

(2)热噪声电流的时间相关函数和均方值

$$\langle I(t)I(t')\rangle=Ae^{-|t-t'|/\tau}+[I_0^2-A]e^{-(t+t')/\tau} \qquad (4)$$

$$\langle I^2(t)\rangle=A+(I_0^2-A)e^{-2t/\tau} \qquad (5)$$

(3)电压涨落的时间相关函数

$$\langle V(t)V(t')\rangle=2ARL\delta(t-t')=2Rk_BT\delta(t-t') \qquad (6)$$

其中已应用能量均分原理：$\frac{1}{2}L\langle I^2\rangle=\frac{1}{2}k_BT$

而有 $A=\frac{k_BT}{L}$。

(4)电量涨落的均方值

$$\langle(\Delta q)^2\rangle=\frac{2k_BT}{L}\tau^2\left[\frac{t}{\tau}-(1-e^{-t/\tau})\right],$$

$$\langle(\Delta q)^2\rangle=\frac{2k_BT}{R}t\ (t\gg\tau) \qquad (7)$$

(5)电压涨落相关函数的谱密度　将热噪声电压 $V(t)$作傅里叶展开,以 $V(\omega)$表示 $V(t)$的傅氏分量,则有

$$V(t)=\int_{-\infty}^{\infty}V(\omega)e^{-i\omega t}d\omega,$$

$$V(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}V(t)e^{i\omega t}dt \qquad (8)$$

由于 $V(t)$是实量,故 $V^*(\omega)=V(-\omega)$。可以求出热噪声电压谱密度的相关函数

$$\langle V(\omega)V(\omega')\rangle=\left(\frac{1}{2\pi}\right)^2 2Rk_BT\int_{-\infty}^{\infty}dt\cdot\int_{-\infty}^{\infty}dt'e^{i\omega t}e^{i\omega' t'}\delta(t-t')=\frac{Rk_BT}{\pi}\delta(\omega+\omega') \qquad (9)$$

$$\langle V(\omega)V^*(\omega')\rangle=\langle V(\omega)V(-\omega')\rangle=\frac{1}{\pi}Rk_BT\delta(\omega-\omega') \qquad (10)$$

电压涨落相关函数的谱密度应为

$$\langle |V(\omega)|^2\rangle = \frac{1}{\pi} Rk_B T \qquad (11)$$

式(9)或(10)是对涨落进行频谱分析得到的结果,称为尼奎斯特(Nyquist)方程,也是涨落耗散定理的一种形式,它表明,电压涨落的不同频率的分量是互不相关的统计事件,而由式(11)看出,各种频率的电压涨落的均方值是相同的。

(6)热电动势 $\mathscr{E}(t) = V(t) + I(t)R$ 的均方值 设

$$\langle \mathscr{E}(t)\mathscr{E}(t+\tau)\rangle = \langle \mathscr{E}^2\rangle \delta(\tau) \qquad (12)$$

注意到 $\langle V(t)\rangle = 0$,即可得到

$$\langle \mathscr{E}(\xi)\mathscr{E}(\xi+\xi')\rangle = \langle V(\xi)V(\xi+\xi')\rangle + R^2\langle I(\xi)I(\xi+\xi')\rangle \qquad (13)$$

将式(13)对 ξ' 积分,并利用线性电路的涨落耗散定理

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{2k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\langle I(t)I(t+t')\rangle \mathrm{d}t',$$
$$R = \frac{1}{2k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\langle V(t)V(t+t')\rangle \mathrm{d}t' \qquad (14)$$

及式(12),即可求出热电动势的均方值

$$\langle \mathscr{E}^2\rangle = 4k_BTR \qquad (15)$$

式(15)也是尼奎斯特定理的一种形式。

***R*-*L* 电路的平均热噪声电流 average thermal noise electric current of *R*-*L* electric circuit** 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

***R*-*L* 电路的热噪声电流的时间相关函数 time correlation function of thermal noise electric current of *R*-*L* electric circuit** 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

***R*-*L* 电路的电压涨落的时间相关函数 time correlation function of voltage fluctuation of *R*-*L* electric circuit** 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

***R*-*L* 电路的电量涨落的均方值 mean square value of electric quantities fluctuation of *R*-*L* electric circuit** 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

尼奎斯特方程 Nyquist equation 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

***R*-*L* 电路的热电动势的均方值 mean square value of thermal electromotive force of *R*-*L* electric circuit** 见“*R*-*L* 电路中的热噪声”。

力学微扰 mechanical perturbation 若系统受外界一小的扰动,偏离平衡不远,即处于近平衡态,这种扰动可看做微扰。外界微扰有两类,力学微扰是其中的一类,它是外力或外场例如电场、磁场等对系统的作用。另一类是热微扰,属于非力学微扰,例如系统与处于不同温度的其他热力学系统作热接触;系统与外功源交往而作功,改变系统的体积;系统与可以交换物质的粒子源相互接触等。

热微扰 thermal perturbation 见“力学微扰”。

线性响应 linear response 系统对外界扰动的反应或回答称为响应。若系统在外界力学微扰下,状态参量对平衡位置的偏离正比于外力,这种响应称为线性响应。设系统在外力 $\boldsymbol{F} = (F_1, F_2, \cdots, F_n)$ 作用下,力学量 $\boldsymbol{a} = (a_1, a_2, \cdots, a_n)$ 与外力耦合,系统对外力的响应可以写做

$$\langle \boldsymbol{a}\rangle = \langle \boldsymbol{a}\rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{R}(t-t')\cdot \boldsymbol{F}(t')\mathrm{d}t'$$
$$= \langle \boldsymbol{a}\rangle_0 + \int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{R}(\tau)\cdot \boldsymbol{F}(t-\tau)\mathrm{d}\tau \qquad (1)$$

式中 $\boldsymbol{R}(t-t')$ 是一实量,称为响应矩阵或响应函数,$\langle \boldsymbol{a}\rangle_0$ 是对平衡系综取的平均值。在任一时刻,系统对外力的响应决定于 $\boldsymbol{R}$,$\boldsymbol{R}$ 反映在任一时刻外力对 $\langle \boldsymbol{a}\rangle$ 的影响。$\boldsymbol{R}(t-t')$ 必须满足因果律

$$\boldsymbol{R}(t-t') = 0,\ t-t' < 0$$

或

$$\boldsymbol{R}(\tau) = 0,\ \tau < 0 \qquad (2)$$

这是因为响应必有原因,外力在先,响应在后。若以 $\langle \boldsymbol{a}(\omega)\rangle$、$\boldsymbol{F}(\omega)$ 和 $\chi(\omega)$ 分别表示 $\langle \boldsymbol{a}(t)\rangle$、$\boldsymbol{F}(t)$ 和 $\boldsymbol{R}(\tau)$ 的傅氏分量,由(1)得

$$\langle \boldsymbol{a}(\omega)\rangle = \chi(\omega)\cdot \boldsymbol{F}(\omega) \qquad (3)$$

$\chi(\omega)$ 称为广义极化率。式(3)表明,一给定频率的力只能激发起同一频率的响应,如果响应函数依赖于力(非线性响应),则这个结论就不对了。将 $\chi(\omega)$ 表示为

$$\chi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{R}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t$$

$$= \int_0^{\infty} \boldsymbol{R}(t)e^{i\omega t}dt \qquad (4)$$

设 $\boldsymbol{R}(t)$弛豫足够快,使$\int_0^{\infty}\boldsymbol{R}(t)dt<\infty$,这是因果律对 $\boldsymbol{R}(t)$的限制:有限的力导致有限的响应。线性响应与涨落耗散定理密切相关,并有广泛的应用,例如布朗运动的微粒平均速度,交变电场中电介质的平均电流,交变磁场中磁介质的平均磁矩等均可作为响应,而相应的广义极化率则分别是迁移率,电导率,磁化率等。

响应矩阵 response matrix 见“线性响应”。

广义极化率 generalized polarizability 见“线性响应”。

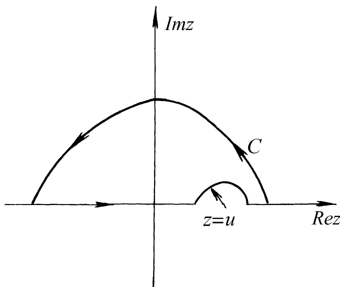
因果律与响应矩阵 causality and response matrices 见“线性响应”。

克拉默斯-克勒尼希关系 Kramers-Kronig relations 表示广义极化率 $\chi(\omega)$的虚部和实部间关系的公式。因响应矩阵 $\boldsymbol{R}(t)$是实量,故其傅氏分量 $\chi(\omega)$应满足 $\chi^*(\omega)=\chi(-\omega)$。定义一新的矩阵

$$\boldsymbol{g}(z)=\frac{\chi(z)}{z-u}, \qquad (1)$$

$z=\omega+i\zeta(\zeta>0)$是复变数,u 是实数。如下图所示,将式(1)对围线 C 积分,使 C 不包围 $\boldsymbol{g}(z)$的极点。由于当 $\zeta\to\infty$时,$\chi(z)\to 0$,无穷大半圆对积分无贡献,于是有

$$\oint_C \frac{\chi(z)}{z-u}dz = \int_{-\infty}^{u-r}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega+\int_{u+r}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega + \int_{\pi}^{0} ir\,e^{i\theta}\frac{\chi(u+re^{i\theta})}{u+re^{i\theta}-u}d\theta = 0 \qquad (2)$$



引入柯西(Cauchy)主部 $P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega = \lim_{r\to\infty}\left[\int_{-\infty}^{u-r}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega+\int_{u+r}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega\right]$,则有

$$\chi(u)=\frac{1}{\pi i}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi(\omega)}{\omega-u}d\omega \qquad (3)$$

再由 $\chi(\omega)=\chi'(\omega)+i\chi''(\omega)$,即可求得实部 $\chi'(\omega)$和虚部 $\chi''(\omega)$间的关系

$$\chi'(u)=\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi''(\omega)}{\omega-u}d\omega,$$

$$\chi''(u)=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi'(\omega)}{\omega-u}d\omega \qquad (4)$$

式(4)称为克拉默斯-克勒尼希关系,它是因果律的结果,若已知 $\chi''(\omega)$,则实部即可算出,反之亦然。虚部 $\chi''(\omega)$可由实验测得,利用式(4)就可求出 $\chi(\omega)$。还可得到

$$\chi(\omega)=\frac{1}{\pi}\lim_{\zeta\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\chi''(\omega)}{\omega'-\omega-i\zeta}d\omega' \qquad (5)$$

利用式(5)及关系式$\langle \boldsymbol{a}(\omega)\rangle=\chi(\omega)\cdot\boldsymbol{F}(\omega)$,又可求出下述响应的公式

$$\langle \boldsymbol{a}\rangle = \langle \boldsymbol{a}\rangle_0+\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega t}\langle \boldsymbol{a}(\omega)\rangle d\omega = \langle \boldsymbol{a}\rangle_0+2i\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{F}(t')\boldsymbol{R}''(t-t')\cdot\theta(t-t')dt' \qquad (6)$$

式中 $\boldsymbol{F}(t')$是外力,$\boldsymbol{R}''(t-t')$是 $\chi''(\omega)$的傅氏变换,$\theta(t-t')=-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega+i\zeta}\frac{d\omega}{2\pi i}$是 Heaviside 函数,$\boldsymbol{R}''(t-t')$简单称为“响应矩阵虚部”。式(6)是常用的公式。

响应和“响应矩阵虚部”的关系 relationship between response and “imaginary part of response matrix” 见“克拉默斯-克勒尼希关系”。

久保第一涨落耗散定理 Kubo first theorem of fluctuation-dissipation 久保于 1957 年导出的关于布朗运动的联系耗散过程和平衡态涨落相关函数的定理。布朗粒子遵从朗之万方程

$$m\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}=-\gamma\boldsymbol{v}+\boldsymbol{F}(t) \qquad (1)$$

微粒的均方位移在变数变换 $u=\frac{1}{2}(\xi+\xi')$,

$u'=\xi'-\xi$ 下可表示为

$$\langle \boldsymbol{r}^2\rangle=\int_0^t\int_0^t\langle \boldsymbol{v}(\xi)\cdot\boldsymbol{v}(\xi')\rangle \mathrm{d}\xi\mathrm{d}\xi'$$

$$=\left[\int_0^{t/2}\mathrm{d}u+\int_{t/2}^{t}\mathrm{d}u\right]\int_{-\infty}^{\infty}\left\langle \boldsymbol{v}\left(u+\frac{u'}{2}\right)\cdot\boldsymbol{v}\left(u-\frac{u'}{2}\right)\right\rangle \mathrm{d}u'$$

$$=t\int\Phi_v(u')\mathrm{d}u' \tag{2}$$

$\Phi_v(u')$ 是以 u' 为宗量的微粒速度自相关函数，对于稳定系综，$\Phi_v(t,t+\tau)=\Phi_v(\tau)$，于是 $\Phi_v(u')$ 的表示式可写做

$$\Phi_v(u')\equiv\left\langle \boldsymbol{v}\left(u+\frac{u'}{2}\right)\cdot\boldsymbol{v}\left(u-\frac{u'}{2}\right)\right\rangle$$

$$=\langle \boldsymbol{v}(u)\cdot\boldsymbol{v}(u+u')\rangle \tag{3}$$

由布朗运动基本关系式

$$\langle \boldsymbol{r}^2\rangle=\frac{6k_BT}{m}\tau^2\left[\frac{t}{\tau}-(1-\mathrm{e}^{-t/\tau})\right];$$

$$\langle \boldsymbol{r}^2\rangle\approx\frac{6k_BT}{m}\tau t=\frac{6k_BT}{\gamma}t(t\gg\tau) \tag{4}$$

并注意到扩散系数 $D=\dfrac{k_BT}{\gamma}$，迁移率 $\mu=\dfrac{1}{\gamma}$，可得久保第一涨落耗散定理

$$\mu=\frac{1}{6k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_v(u')\mathrm{d}u'$$

或

$$D=\frac{1}{6}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_v(u')\mathrm{d}u' \tag{5}$$

久保给出的是一维布朗运动复迁移率与速度自相关函数的关系

$$\mu(\omega)=\frac{1}{k_BT}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle v(t_0)v(t_0+t)\rangle\mathrm{d}t \tag{6}$$

式(5)、(6)把用 μ 或 D 描述的非平衡耗散过程与表征平衡态涨落的速度相关函数联系起来。通过与上面完全相同的变数变换，可将式(1)的解写成

$$\langle v^2(t)\rangle=v^2(0)\mathrm{e}^{-2t/\tau}+\frac{\mathrm{e}^{-2t/\tau}}{m^2}\cdot\int_0^t\int_0^t\mathrm{e}^{(\xi+\xi')/\tau}\langle \boldsymbol{F}(\xi)\cdot\boldsymbol{F}(\xi')\rangle\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\xi'$$

$$=v^2(0)\mathrm{e}^{-2t/\tau}+\frac{\tau}{2m^2}(1-\mathrm{e}^{-2t/\tau})\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{\mathrm{F}}(u')\mathrm{d}u' \tag{7}$$

其中利用了 $\langle \boldsymbol{F}(\xi)\rangle=0$，以 u' 为宗量的涨落力自相关函数

$$\Phi_{\mathrm{F}}(u')\equiv\left\langle \boldsymbol{F}\left(u+\frac{u'}{2}\right)\cdot\boldsymbol{F}\left(u-\frac{u'}{2}\right)\right\rangle$$

$$=\langle \boldsymbol{F}(u)\cdot\boldsymbol{F}(u+u')\rangle \tag{8}$$

描述涨落力在两时刻的相关性，某一时刻的值对另一时刻的值的影响。对于稳定系综，$\Phi_{\mathrm{F}}(t,t+\tau)=\Phi_{\mathrm{F}}(\tau)$，与时间 t 无关，且 $\Phi_{\mathrm{F}}(0)=\langle \boldsymbol{F}^2(t)\rangle=$ 常数 >0，$\Phi_{\mathrm{F}}(-\tau)=\Phi_{\mathrm{F}}(\tau)$。当 $t\to\infty$ 时，系统对应平衡态，遵从能量均分原理。可得久保第二涨落耗散定理

$$\gamma=\frac{m}{\tau}=\frac{1}{6k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{\mathrm{F}}(u')\mathrm{d}u'$$

$$=\frac{1}{6k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\langle \boldsymbol{F}(u)\cdot\boldsymbol{F}(u+u')\rangle\mathrm{d}u' \tag{9}$$

久保 1966 年给出的是一维布朗运动复黏性系数与涨落力自相关函数的关系

$$\gamma(\omega)=\frac{1}{k_BT}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\langle F(t_0)\cdot F(t_0+t)\rangle\mathrm{d}t \tag{10}$$

式(9)、(10)把用黏性系数描述的非平衡耗散过程与平衡态涨落力自相关函数联系起来。可以说，这两条定理是用表示平衡态的量来描述非平衡过程的关系式。

久保第二涨落耗散定理 Kubo second theorem of fluctuation-dissipation 见“久保第一涨落耗散定理”。

***R*-*L* 线性电路的涨落耗散定理 fluctuation-dissipation theorem of *R*-*L* linearity electric circuit** 在一含电阻 R、电感 L 的线性电路中，由于电子的热运动，线路中产生热噪声，出现“自发的”电动势，其噪声电流 $\boldsymbol{I}$ 遵从下列方程

$$L\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{I}}{\mathrm{d}t}=-R\boldsymbol{I}+\boldsymbol{V}(t),\langle \boldsymbol{V}(t)\rangle=0 \tag{1}$$

其中 $\boldsymbol{V}(t)$ 是热噪声电压，它是一快速涨落的量。式(1)与布朗粒子遵从的朗之万方程 $m\dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\gamma\boldsymbol{v}+\boldsymbol{F}(t)$ 完全类似，于是可将它们相当的量一一对应起来：$m\leftrightarrow L$，$\gamma\leftrightarrow R$，$\boldsymbol{v}\leftrightarrow\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{F}(t)\leftrightarrow\boldsymbol{V}(t)$。根据久保涨落耗散定理，可直

接写出线性电路的两条涨落耗散定理如下

$$\frac{1}{R}=\frac{1}{6k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_I(u')\mathrm{d}u',$$

$$\Phi_I(u')=\langle \boldsymbol{I}(u)\cdot \boldsymbol{I}(u+u')\rangle \qquad (2)$$

$$R=\frac{L}{\tau}=\frac{1}{6k_BT}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_V(u')\mathrm{d}u',$$

$$\Phi_V(u')=\langle \boldsymbol{V}(u)\cdot \boldsymbol{V}(u+u')\rangle \qquad (3)$$

对于电路中电子作一维运动情形只需将式(2)和(3)中$\frac{1}{6k_BT}$改成$\frac{1}{2k_BT}$，粗体的 $\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 改为通常的 I 和 V 即可。式中 $\tau=\frac{L}{R}$是线性电路的弛豫时间，Φ_I 和 Φ_V 分别为热噪声电流和热噪声电压的自相关函数。式(2)和(3)同样表示描述耗散过程的物理量与表征平衡态相关函数之间的关系。

卡伦-韦尔顿涨落耗散定理 Callen-Welton theorem of fluctuation-dissipation 联系平衡涨落相关函数和广义极化率或输运系数的具有普遍意义的定理。考虑外界对系统绝热地施加依赖于时间的力学微扰，外力 $\boldsymbol{F}(t)=(F_1(t),F_2(t),\cdots,F_n(t))$与系统的力学变量 $\boldsymbol{b}=(b_1,b_2,\cdots,b_n)$耦合，以 $\boldsymbol{R}(t-t')$表示响应矩阵，系统对外界微扰的线性响应为

$$\langle \boldsymbol{b}\rangle=\langle \boldsymbol{b}\rangle_0+\int_{-\infty}^{t}\boldsymbol{R}(t-t')\cdot \boldsymbol{F}(t')\mathrm{d}t' \qquad (1)$$

可以证明，广义极化率 $\chi(\omega)$的矩阵元为

$$\chi_{ik}(\omega)=-\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega'}-1)\cdot\Phi_{b_kb_i}(\omega')\frac{\mathrm{d}\omega'}{\omega-\omega'+i\varepsilon}$$

$$=\frac{i}{2\hbar}(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1)\Phi_{b_kb_i}(\omega)-\frac{1}{2\pi\hbar}P\int_{-\infty}^{\infty}(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1)\cdot\Phi_{b_kb_i}(\omega')\frac{\mathrm{d}\omega'}{\omega-\omega'} \qquad (2)$$

$$\Phi_{b_kb_i}(\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\langle(b_k(t)-\langle b_k\rangle_0)\cdot(b_i(t')-\langle b_i\rangle_0)\rangle\mathrm{e}^{-i\omega(t-t')}\mathrm{d}t \qquad (3)$$

$\Phi_{b_kb_i}(\omega)$是 $\boldsymbol{b}$ 的分量 b_k 和 b_i 时间相关函数的傅氏分量。式中$\langle\cdots\rangle$表示对平衡系综取平均值，$\beta=\frac{1}{k_BT}$。式(2)称为卡伦-韦尔顿涨落耗散定理，它用平衡涨落相关函数的谱密度式(3)表示复广义极化率 χ_{ik}。当 $\hbar\to 0$ 时，式(2)取经典形式

$$\chi_{ik}(\omega)=-\frac{\beta}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\Phi_{b_kb_i}(\omega')\cdot\frac{\omega'\mathrm{d}\omega'}{\omega-\omega'+i\varepsilon} \qquad (4)$$

若定义时间相关函数：$\{b_k(t),b_i(t')\}=\frac{1}{2}[\langle b_k(t)b_i(t')\rangle+\langle b_i(t')b_k(t)\rangle]$，可导出

$$\{(b_i(t)-\langle b_i\rangle_0),(b_k(t')-\langle b_k\rangle_0)\}=\frac{i\hbar}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}[\chi_{ik}^*(\omega)-\chi_{ki}(\omega)]\cdot\coth\frac{\beta\hbar\omega}{2}\mathrm{e}^{i\omega(t-t')}\mathrm{d}\omega \qquad (5)$$

在只有一个变量的情形下，式(5)简化为

$$\langle(b-\langle b\rangle_0)^2\rangle=\frac{\hbar}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\chi''(\omega)\coth\frac{\beta\hbar\omega}{2}\mathrm{d}\omega \qquad (6)$$

式(5)和(6)与式(2)相反，是用复广义极化率表示平衡涨落相关函数的 $C-W$ 涨落耗散定理。式(6)应用广泛，它以实验上可测量的 $\chi(\omega)$虚部 $\chi''(\omega)$表示力学量 b 的均方值。当系统受到外界力学微扰时，内部将产生"流"$\langle \boldsymbol{b}_j\rangle$，$\boldsymbol{b}_j$ 称为流算符，系统的响应可写做 $\langle \boldsymbol{b}\rangle=\int_{-\infty}^{t}\boldsymbol{L}(t-t')\cdot\boldsymbol{F}(t')\mathrm{d}t'$，其中不包含$\langle \boldsymbol{b}\rangle_0$项，因为它等于零。$\boldsymbol{L}(t-t')$称为输运系数或动力学系数矩阵，关于输运系数的 $C-W$ 涨落耗散定理也有与广义极化率相似的形式。涨落耗散定理作为近平衡态一条重要定理，深刻地揭示了同时存在的涨落和耗散两种现象间的关联，将宏观系统的一些非平衡性质通过平衡性质表示出来。

昂萨格倒易关系 Onsager reciprocal relations 又称广义极化率或输运系数的对称性原理。昂萨格 1931 年根据微观运动的可逆性，用唯象论方法发现系统处于线性区时，在"流"(J_i)和"力"(X_j)所遵从的下述关系

$$J_i=\sum_{j=1}^{n}L_{ij}X_j(i=1,2,\cdots) \qquad (1)$$

中，唯象系数矩阵 L_{ij}是对称的，即

$$L_{ij}=L_{ji} \qquad (2)$$

从统计物理的角度看，微观可逆性要求，算符

(或经典情形下力学量)的运动方程对于时间反演 $t \to -t$ 是不变的。这种不变性意味着当 $t \to -t, t' \to -t', i \to -i$ 时, $\hat{A} \to \varepsilon_A \hat{A}$, $\hat{B} \to \varepsilon_B \hat{B}$, $\varepsilon_A, \varepsilon_B$ 分别是按照算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 在速度反演下的奇偶性而取值: $\varepsilon_A, \varepsilon_B = \mp 1$。对于有磁场的情形,在时间反演的同时进行磁场的反演 $\boldsymbol{B} \to -\boldsymbol{B}$,运动方程仍然不变。利用 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 时间相关函数谱密度的对称性和涨落耗散定理得出关于广义极化率的对称关系

$$\chi_{jk}(\omega) = \chi_{kj}(\omega)\varepsilon_j\varepsilon_k,$$
$$\chi_{jk}(\omega, \boldsymbol{B}) = \chi_{kj}(\omega, -\boldsymbol{B})\varepsilon_j\varepsilon_k, \varepsilon_j\varepsilon_k = \pm 1 \quad (3)$$

将 χ_{jk} 分成对称 $\chi_{jk}^s = \frac{1}{2}(\chi_{jk} + \chi_{kj})$ 和反对称 $\chi_{jk}^a = \frac{1}{2}(\chi_{jk} - \chi_{kj})$ 两部分,则有

$$\chi_{jk}^s(\omega, \boldsymbol{B}) = \chi_{kj}^s(\omega, -\boldsymbol{B})\varepsilon_j\varepsilon_k,$$
$$\chi_{jk}^a(\omega, \boldsymbol{B}) = -\chi_{kj}^a(\omega, -\boldsymbol{B})\varepsilon_j\varepsilon_k \quad (4)$$

$$\chi_{jk}^s(\omega, \boldsymbol{B}) = \chi_{kj}^s(\omega, -\boldsymbol{B}) (\text{取 } \varepsilon_j\varepsilon_k = 1),$$
$$\chi_{jk}^a(\omega, \boldsymbol{B}) = -\chi_{kj}^a(\omega, -\boldsymbol{B}) (\text{取 } \varepsilon_j\varepsilon_k = 1) \quad (5)$$

也可得到输运系数的完全类似的对称式。式(2)—(5)均称为昂萨格关系(或定理),它适用于任何微扰引起的非平衡过程,是近平衡热力学统计物理的重要基础。

灯丝电子发射的涨落电流相关函数 correlation function of fluctuation electric current for filament electronic emission 由于灯丝发射电子带有随机性,会出现电流的涨落,导致信号中的噪声。设阴极平均每秒发射 n 个电子,平均电流为 $\langle I \rangle = ne$,实际电流是

$$I(t) = \langle I \rangle + I_1(t) \quad (1)$$

其中 I_1 是涨落电流,其平均值为零。每个电子的发射是统计独立的,随机量 $I_1(t)$ 的相关函数为

$$\begin{aligned}\Phi_{I_1 I_1}(\tau) &= \langle I_1(t) I_1(t+\tau) \rangle \\ &= \langle I_1^2 \rangle \delta(\tau) \\ &= e^2 n \delta(\tau) \\ &= e \langle I \rangle \delta(\tau) \quad (2)\end{aligned}$$

涨落电流相关函数的谱密度(傅氏分量)由下式给出

$$\begin{aligned}\varphi_{I_1 I_1}(\omega) &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_{I_1 I_1}(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau \\ &= \frac{1}{2\pi} e \bar{I} \quad (3)\end{aligned}$$

可见,涨落电流的值与频率无关,也不依赖于温度,而与平均电流成正比,因此,不能通过降温或选频等手段来减弱噪声。

外电场 $\boldsymbol{E}$ 存在情形下带电布朗粒子系统的电导率 electric conductivity of charged Brownian particle system at external field $\boldsymbol{E}$ 设带电布朗粒子的速度 $v(t)$ 遵从下列朗之万方程

$$\dot{v}(t) = -\int_{-\infty}^{t} \alpha(t - t') v(t') dt' + \frac{F(t)}{m} + \frac{K(t)}{m} \quad (1)$$

其中黏性系数 $\alpha(t - t')$ 不是常数, $F(t)$ 是涨落力,外力 $K(t)$:

$$K(t) = \mathrm{Re}\, eE_0 e^{-i\omega t} \quad (2)$$

以 $R(t)$ 表示响应函数,它满足因果律。系统的响应为

$$\begin{aligned}\langle v(t) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} R(t - t') K(t') dt' \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) K(t - \tau) d\tau \quad (3)\end{aligned}$$

将式(2)代入式(3),并将广义极化率取为复数迁移率 $\mu(\omega)$

$$\begin{aligned}\mu(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \\ &= \int_{0}^{\infty} R(\tau) e^{i\omega\tau} d\tau \quad (4)\end{aligned}$$

于是得出

$$\begin{aligned}\langle v(t) \rangle &= \mathrm{Re}\; eE_0 e^{-i\omega t} \mu(\omega) \\ &= \mathrm{Re}\; eE_0 e^{-i\omega t} \frac{1}{m} \frac{1}{(-i\omega + \alpha(\omega))} \quad (5)\end{aligned}$$

式(5)中第2式是对式(1)取平均,并注意到 $\langle F(t) \rangle = 0$ 及 $\alpha(\omega) = \int_0^{\infty} \alpha(t) e^{i\omega t} dt$ 得到的。由电场诱发的电流密度 $J(t)$ 可写做

$$\begin{aligned}J(t) &= en \langle v(t) \rangle \\ &= \mathrm{Re}\; e^2 n E_0 e^{-i\omega t} \frac{1}{m} \frac{1}{(-i\omega + \alpha(\omega))} \quad (6)\end{aligned}$$

式中 n 是粒子的浓度, e 是粒子所带电荷。复数电导率显然为

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 n}{m} \frac{1}{[-i\omega + \alpha(\omega)]} \quad (7)$$

六、非平衡态统计物理
Nonequilibrium Statistical Physics

玻尔兹曼方程 Boltzmann equation　玻尔兹曼1872年提出的关于粒子分布函数 $f(\boldsymbol{v},\boldsymbol{r},t)$随时间演化的方程。$f(\boldsymbol{v},\boldsymbol{r},t)$随时间 t 的变化来源于两个方面:粒子的漂移运动和粒子间的碰撞作用。它们对 f 的时间变率的贡献是相加的,故有

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{d}}+\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}} \tag{1}$$

在漂移过程中,粒子的坐标和速度按力学运动方程连续变化,即 $\boldsymbol{r}\rightarrow\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}\delta t$, $\boldsymbol{v}\rightarrow\boldsymbol{v}'=\boldsymbol{v}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\delta t$, $\boldsymbol{F}$ 是外力。应有 $f(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{v}',t+\delta t)=f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)$,因此

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{d}}=-\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}-\frac{\boldsymbol{F}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}} \tag{2}$$

碰撞使 $\boldsymbol{r}\rightarrow\boldsymbol{r}+d\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{v}\rightarrow\boldsymbol{v}+\mathrm{d}\boldsymbol{v}$ 范围内粒子有进有出,而用$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}}$表示其净效果。于是可将式(1)写做

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}} \tag{3}$$

式(3)称为玻尔兹曼方程,对于定常态,$\frac{\partial f}{\partial t}=0$,式(3)化为

$$\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}} \tag{4}$$

式(4)称为定常态玻尔兹曼方程。可以采用弛豫时间近似法处理和讨论碰撞项。若对系统加上一种“力”例如温度梯度或去掉外力,则 f 偏离平衡分布 f_{e},分子间碰撞又使 f 趋于 f_e,这可视为弛豫过程。以 $\tau(\boldsymbol{v})$表示弛豫时间,可以写出下述关系式

$$f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)-f_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})=[f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},0)-f_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})]\mathrm{e}^{-t/\tau} \tag{5}$$

$\tau(v)$描述分布函数对平衡值的偏离按指数规律衰减的快慢程度,它与粒子平均自由飞行时间的数量级相同。可以看出,碰撞项的作用是削弱漂移的影响,外力场存在时,它使 f 趋于稳定值,突然撤掉外力场时,则使系统趋于平衡。

粒子分布函数的时间变率 time change rate of particle distribution function　见“玻尔兹曼方程”。

碰撞项 collision term　见“玻尔兹曼方程”。

漂移项 drift term　见“玻尔兹曼方程”。

定常态玻尔兹曼方程 Boltzmann equation at steady state　见“玻尔兹曼方程”。

碰撞项的弛豫时间近似 relaxation time approximation for collision term　见“玻尔兹曼方程”。

玻尔兹曼积分微分方程 Boltzmann integro-differential equation　又称为玻尔兹曼输运方程。粒子分布函数 f 随时间的演化遵从玻尔兹曼方程

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\frac{\boldsymbol{F}}{m}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{v}}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}} \tag{1}$$

假定气体足够稀薄,可只考虑二体碰撞效应,并认为碰撞是完全弹性的,分子的速度与位置互不相关(分子混沌性假设),玻尔兹曼导出碰撞项

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{c}}=\int\mathrm{d}\Omega\int\mathrm{d}\boldsymbol{v}_1\,\sigma(\Omega)\,|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_1|\cdot[f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}',t)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1',t)-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1,t)] \tag{2}$$

其中 $\sigma(\Omega)$是在立体角 Ω 内的碰撞截面,$\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}'$, $\boldsymbol{v}_1'$为分子碰撞前后的速度。式(1)和(2)合在一起称为玻尔兹曼积分微分方程,是 $f(\boldsymbol{v},\boldsymbol{r},t)$所满足的非线性方程,它作为非平衡统计物理的重要基础,有广泛的应用。

玻尔兹曼 *H* 定理 Boltzmann *H*-theorem　玻尔兹曼在研究热力学系统趋向平衡或热力学过程的不可逆性问题时,1872年定义 H 函数为

$$H(t)=\iint\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{v}f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)\ln f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t) \tag{1}$$

并证明这个函数不可能随时间而增大,即

$$\frac{\mathrm{d}H(t)}{\mathrm{d}t}\leqslant 0 \tag{2}$$

式(2)就是玻尔兹曼 H 定理。它表明分子相互随机性碰撞导致分布函数发生变化时,

$H(t)$函数总是单调地减小，直至最小值且不再变化，系统达到平衡。因此，H定理解释了宏观过程的不可逆性是分子间相互碰撞的结果。利用玻尔兹曼积分微分方程及式(1)，并让 $f\equiv f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v},t)$，$f'\equiv f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}',t)$，$f_1\equiv f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}_1,t)$，$f'_1\equiv f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v}'_1,t)$，得到

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{4}\iiiint(f'f'_1-ff_1)(\ln f'f'_1-\ln ff_1)\sigma(\Omega)|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}_1|\mathrm{d}\boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{v}_1\mathrm{d}\Omega \tag{3}$$

显然，由式(3)可得到式(2)，式(2)中等号成立的条件，是碰撞前后的分布函数满足下述细致平衡原理

$$f'f'_1=ff_1 \tag{4}$$

它表明，正反碰撞过程的效果相互抵消，分子碰撞不会对分布函数产生影响，系统建立了平衡。满足式(4)的$f(\boldsymbol{v})$就是麦克斯韦速度分布函数。当系统达到平衡时，细致平衡条件必须满足。该原理反映随机性碰撞过程规律，也是微观描述动态平衡的一种形式。比较式(1)和熵的表式

$$S=-k_B\sum f\ln f$$

或

$$S=-k_B\iint f\ln f\frac{m^3}{h^3}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\mathrm{d}\boldsymbol{v} \tag{5}$$

即可知道玻尔兹曼 H 函数就是负熵，H 函数的减小和熵 S 的增加是等效的。H 定理和熵定理同样阐明了不可逆过程的微观本质。

玻尔兹曼 *H* 函数 Boltzmann *H*-function 见“玻尔兹曼 H 定理”。

细致平衡原理 detailed balancing principle 见“玻尔兹曼 H 定理”。

熵和 *H* 函数 entropy and *H*-function 见“玻尔兹曼 H 定理”。

洛喜密脱佯谬 Loschmidt paradox 又称可逆性佯谬，洛喜密脱于 1876 年提出。他认为，根据时间反演不变性（即微观运动可逆性）的力学规律，当气体中所有分子的速度同时反向时，则每个分子将沿着与原来相反的方向运动，因此，H 函数会因分子碰撞而随时间上升，导致 H 函数单调下降的结论不能成立。玻尔兹曼从 H 定理的统计性质正确地回答了这个问题。他指出，气体的所有分子的速度同时出现反转的可能性微乎其微，相应的 H 函数上升的概率极小，而单调下降的概率却是极大的。可以得出结论，H 函数上升这种宏观过程不会出现，可逆性佯谬是不成立的。

策尔梅洛佯谬 Zermelo paradox 又称循回性佯谬，策尔梅洛于 1896 年提出。他根据庞加莱定理指出，当 H 函数随时间单调地减少以后，只要经过足够长的时间，它将回复到初始的数值，因而玻尔兹曼 H 定理不能成立。玻尔兹曼对上述矛盾作了明确的回答：H 定理具有统计的性质，它只是说非平衡态总以绝对优势的概率趋于平衡态，没有完全否定相反演变的可能性，并不完全排斥 H 函数值偶然增加，运动回复到原状，只是概率极其微小，对于一般的气体和液体，若单位体积含粒子数为 10^{23}的数量级，那么回复时间的数量级为 $10^{10^{23}}$秒，这比宇宙寿命还要大很多数量级，表明循回到初态的概率几乎是零，实际上是观测不到的，所以，H 定理和庞加莱定理可以相容，循回性佯谬并不成立。

分子混沌拟设 molecular chaos hypothesis 与力学运动方程根本不同，由玻尔兹曼积分微分方程导出的 H 定理是不可逆的，这是由于在推导玻尔兹曼积分微分方程过程中引入了统计假设——分子混沌拟设：粒子的速度与位置没有关联，粒子的速度 $\boldsymbol{v}_1$ 和 $\boldsymbol{v}_2$ 是不相关的。由于碰撞的随机性，粒子各自的分布函数是统计独立的。具体地说，在 $\boldsymbol{r}_1$ 处速度为 $\boldsymbol{v}_1$ 的分子和速度为 $\boldsymbol{v}_2$ 的分子的分布函数都是 f，不会因 $\boldsymbol{v}_1$ 分子的存在而影响 $\boldsymbol{v}_2$ 分子的概率分布，反之亦然，从而在计算正反碰撞过程时，都出现两个分布函数即两个概率的乘积。这个假设的数学形式为

$$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{v}_2,t)$$
$$=f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{v}_1,t)f(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{v}_2,t)$$

庞加莱定理 Poincare theorem 1890 年庞加莱证明了下述定理：系统的 Γ 相空间中除了一

个零测度的点集外，在 $t=0$ 时刻使系统从相空间中任何一有界点 P 出发，则对于任意一给定的小距离 $\varepsilon>0$，都存在一有限的时间 $T_P(\varepsilon)$，在此时间内，系统必经过相空间的一点 P'，而 $|\overline{PP'}|<\varepsilon$。就是说，力学体系经过足够长的时间后，总要回复到任意接近初态的那个状态。此结论似乎同 H 定理相矛盾，然而，回复到初态所需时间是极长的，例如 N 个自旋粒子的系统，再接近到初态（严格说附近的 $\Delta\varphi$ 内）的时间即庞加莱周期大致为

$$T_P\approx\left(\frac{2N}{\Delta\varphi}\right)^N\bigg/\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\varphi}\right)$$

其中 $\Delta\omega$ 是自旋粒子进动角频率的宽度。若取 $N=10$，$\Delta\phi=\pi/100$，$\Delta\omega=10\mathrm{s}^{-1}$，则 $T_P\approx 10^{10}y$。又如，设一空室分为均等的左右两半，N 个分子全部在左半室为初态，若取 $N\approx10^{23}$，原子的反应时间 $\approx10^{-12}\mathrm{s}$，则 $T_P\approx2.3\times2^{10^{23}}\times10^{-12}\mathrm{s}$。可见，庞加莱周期远大于宇宙寿命。因此，对于任何宏观系统来说，这是根本不可能发生的。玻尔兹曼 H 定理与庞加莱定理并不矛盾。

玻尔兹曼方程对金属电子气的应用 application of Boltzmann equation to metal electronic gas　设在外场 $\boldsymbol{E}$ 和热源的作用下，处于局部平衡的金属电子气系统内存在稳定的电场和温度梯度，但它们都不大，非平衡分布函数 $f=f_e+\Delta f(\Delta f\ll f_e)$，$f_e$ 是遵从费米分布 $f_e=\dfrac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}$ 的局域平衡分布。玻尔兹曼方程中的碰撞项采用弛豫时间 τ 近似：$\left(\dfrac{\partial f}{\partial t}\right)_c=-\dfrac{f-f_e}{\tau}$，漂移项近似地写做 $\left(\dfrac{\partial f}{\partial t}\right)_d\approx-\boldsymbol{v}\cdot\dfrac{\partial f_e}{\partial\boldsymbol{r}}-\dfrac{e\boldsymbol{E}}{m}\dfrac{\partial f_e}{\partial\boldsymbol{v}}$，这两部分共同作用的结果，系统存在定常态解：$\dfrac{\partial f}{\partial t}=\left(\dfrac{\partial f}{\partial t}\right)_d+\left(\dfrac{\partial f}{\partial t}\right)_c=0$，可以求得

$$f=f_e-\tau\frac{\partial f_e}{\partial\varepsilon}\left\{e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\cdot\left[\varepsilon\frac{\partial\ln T}{\partial\boldsymbol{r}}+T\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right]\right\}\quad(1)$$

（1）电流密度　利用式（1）算出平均电流密度

$$\begin{aligned}j_l&=e\int v_lf(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})\frac{2m^3}{h^3}\mathrm{d}\boldsymbol{v}\\&=e^2L_1E_l+eL_2\left(-\frac{\partial\ln T}{\partial x_l}\right)\\&\quad+eL_1\left(-T\frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right)\end{aligned}\quad(2)$$

其中积分号内因子 2 是自旋简并度数，并已定义

$$L_n=\frac{2}{3m}\int_0^\infty\tau\varepsilon^n\left(-\frac{\partial f_e}{\partial\varepsilon}\right)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon,$$

$$D(\varepsilon)=\frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}\varepsilon^{1/2}\quad(3)$$

式（2）右端第 1 项是欧姆定律的微分形式；第 2、3 项是温差电动势对电流的贡献。

（2）热流密度　由式（1）算出平均热流密度

$$\begin{aligned}q_l&=\int\varepsilon v_lf(\boldsymbol{r},\boldsymbol{v})\frac{2m^3\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{h^3}\\&=eL_2E_l+L_3\left(-\frac{\partial\ln T}{\partial x_l}\right)\\&\quad+L_2\left(-T\frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right)\end{aligned}\quad(4)$$

式（4）右端第 2、3 项是由于温度梯度和化学势梯度引起的贡献，反映热传导现象，第 1 项隐含佩尔捷效应（Peltier effect）。

（3）电导率　若金属材料是均匀的，且不存在温度梯度，则式（2）变为

$$j_l=e^2L_1E_l\quad\text{或}\quad\boldsymbol{j}=e^2L_1\boldsymbol{E}=\sigma\boldsymbol{E}\quad(5)$$

其中电导率 σ 及其张量元 σ_{lj} 的表示式为

$$\begin{aligned}\sigma&=e^2L_1\\&=e^2\frac{2}{3m}\int_0^\infty\tau\varepsilon\left(-\frac{\partial f_e}{\partial\varepsilon}\right)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon,\\\sigma_{lj}&=e^2\int_0^\infty\tau\,\overline{v_lv_j}\left(-\frac{\partial f_e}{\partial\varepsilon}\right)D(\varepsilon)\mathrm{d}\varepsilon\end{aligned}\quad(6)$$

其中 $\overline{v_lv_j}=\dfrac{1}{4\pi}\iint v_lv_j\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 表示量 v_lv_j 按等能面求得的平均值。由于费米分布的导数 $-\dfrac{\partial f_e}{\partial\varepsilon}$ 在 $\varepsilon=\mu$ 处为极大且尖锐，于是有

$$\sigma=\frac{8\pi}{3}e^2\tau(\mu)\frac{(2m\mu)^{3/2}}{mh^3}=\frac{ne^2}{m}\tau(\mu),$$

$$\sigma_{lj}=e^2\tau(\mu)\overline{v_lv_j}^FD(\mu)\quad(7)$$

式中 $n=\frac{(2m\mu)^{3/2}}{\frac{3}{8\pi}h^3}$是电子数密度。若自由电子等能面是球面，则有$\overline{v_l v_j}^F=\delta_{lj}\frac{2\mu}{3m}$，因此代入式(7)中第2式也得到第1式。

(4)热导率　通常热导率是指除去佩尔捷效应的热流密度与温度梯度成正比的关系，因此必须让 $j_l=0$，同时外场 $\boldsymbol{E}=0$。由式(2)和(4)即得

$$
\begin{aligned}
q_l &= L_3\left(-\frac{\partial \ln T}{\partial x_l}\right)+L_2\left(-T\frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\mu}{T}\right)\right)\\
&=-\frac{L_1L_3-L_2^2}{L_1T}\left(\frac{\partial T}{\partial x_l}\right)\\
&=-\kappa\left(\frac{\partial T}{\partial x_l}\right) \qquad (8)
\end{aligned}
$$

故热导率为

$$\kappa=\frac{L_1L_3-L_2^2}{L_1T} \qquad (9)$$

(5)维德曼-弗兰兹常数(Wiedemann-Franz constant)　假定 $\tau=B|\boldsymbol{v}|$，注意到$|\boldsymbol{v}|=\left(\frac{2\varepsilon}{m}\right)^{1/2}$，利用式(3)可算出 L_n，于是得到热导率近似表式

$$\kappa=\frac{n}{m}\tau(\mu_0)\frac{\pi^2}{3}k_B^2T \qquad (10)$$

其中 μ_0 是 $T=0\mathrm{K}$ 时的 μ 值，联立式(10)和(7)，则有

$$\frac{\kappa}{T\sigma}=\frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k_B}{e}\right)^2$$

可见，金属的热导率和电导率之比除以温度为一常数，称为维德曼-弗兰兹常数。对于金、银与铜，室温下理论值与实验值符合得很好，低温时偏差较大。

金属电子气的电流密度　electric current density of metal electronic gas　见“玻尔兹曼方程对金属电子气的应用”。

金属电子气的热流密度　heat flow density of metal electronic gas　见“玻尔兹曼方程对金属电子气的应用”。

金属电导率　metallic electric conductivity　见“玻尔兹曼方程对金属电子气的应用”。

金属热导率　metallic thermal conductivity　见“玻尔兹曼方程对金属电子气的应用”。

德维曼-弗兰兹常数　Widemann-Franz constant　见“玻尔兹曼方程对金属电子气的应用”。

福克-普朗克方程　Fokker-Planck equation　与描述随机系统的朗之万方程相对应的概率分布函数所遵从的演化方程，由福克和普朗克首先从朗之万方程导出。设宏观变量 $a(t)$代表一稳定的随机过程，遵从朗之万方程

$$\dot{a}(t)=-\gamma a(t)+F(t) \qquad (1)$$

式中随机力 $F(t)$代表一噪声源，它满足下列条件

$$
\begin{aligned}
&\langle F(t)\rangle=0,\\
&\langle F(t)F(t')\rangle=2A\delta(t-t') \qquad (2)
\end{aligned}
$$

其中 A 表示噪声强度。式(2)表明 $F(t)$具有白谱，且是一高斯过程，显然 $a(t)$也是一高斯过程，且是一马尔科夫过程，即无后效性的随机过程。a 的概率分布函数 $P(a,t)$遵从下列方程

$$\frac{\partial}{\partial t}P(a,t)=\frac{\partial}{\partial a}\gamma aP(a,t)+D\frac{\partial^2}{\partial a^2}P(a,t) \qquad (3)$$

式(3)右端第1项是漂移项，第2项是扩散项，其中

$$D=\int_0^\infty\langle F(t_0)F(t_0+t)\rangle\mathrm{d}t \qquad (4)$$

是扩散系数。式(3)即为与式(1)相对应的 $F-P$ 方程。并有

$$P_e(a)=C\mathrm{e}^{-\gamma a^2/2D} \qquad (5)$$

其中 C 为常数，$P_e(a)$表示平衡分布。容易得出

$$
\begin{aligned}
\gamma &= \frac{D}{\langle a^2\rangle_0}\\
&=\frac{1}{\langle a^2\rangle_0}\int_0^\infty\langle F(t_0)F(t_0+t)\rangle\mathrm{d}t \qquad (6)
\end{aligned}
$$

而$\langle a^2\rangle_0$则是 $a(t)$的平衡涨落的均方值，即 $a(t)$的相关函数

$$\langle a(t)a(t')\rangle=\langle a^2\rangle_0\mathrm{e}^{-\gamma|t'-t|} \qquad (7)$$

的强度。式(4)是根据涨落耗散定理得到的。

线性非平衡过程　linear nonequilibrium process　系统偏离平衡但离开平衡不远的状态称

为近平衡状态，相应的过程叫做近平衡过程，它通常是线性非平衡过程，如涨落、弛豫、输运（耗散）过程等。近平衡态的主要特征是趋向平衡。当处于平衡的系统在小的扰动作用下将偏离平衡，扰动一旦取消，则系统经过一定时间（称为弛豫时间）将回到平衡，这类过程叫做弛豫过程。若适当控制外界条件，如温度差、浓度差或电位差（统称广义力，或热力学力，以 X_j 表示）等，使系统维持在近平衡态，则系统内产生持续不断的、与广义力成正比的广义流（或称热力学流，以 J_i 表示），如热流、粒子流或电流等，它们分别描述能量、质量或电荷等的转移和输运，过程中必须消耗能量或物质，故称之为输运或耗散过程。涨落过程是描述系统状态的宏观参量围绕其平衡值起伏的过程。上述几种过程都是由趋于平衡这一总的倾向决定的，所以它们之间有着内在的联系。

广义力和广义流 generalized force and generalized current　见“线性非平衡过程”。

局域平衡假设 local equilibrium hypothesis　为使极其复杂的非平衡问题得到简化，并使平衡态热力学的方法和原理推广应用于非平衡态，可采用局域平衡假设：将系统划分为许多小部分，每个小的部分宏观上看很小，微观上足够大，包含相当多的粒子，其弛豫时间 $\tau \ll \Delta t \ll t$，t 是整个系统的弛豫时间，Δt 为观察的时间，可认为整个系统是非平衡的，但局域则是平衡的。于是，从宏观上看，各宏观量如组元密度 $\rho_j(j=1,2,\cdots,n)$ 在分子平均自由程量级的距离内的变化远小于该量本身，从微观上看，系统内粒子的动量分布和相对位置分布局域地趋于平衡分布。每个小部分的态参量可视为常数，它的各个热力学函数只与该小部分的态参量有关，而与参量的梯度无关。系统的诸热力学函数就等于所有小部分的相应的热力学函数的叠加。例如，将局域熵记作 $s_v = s_v(\{\rho_j(\boldsymbol{r},t)\})$，整个系统的非平衡态的熵可表示为

$$S = \int s_v \mathrm{d}V$$

线性唯象律 linear phenomenological law　不可逆过程中热力学流和热力学力的线性组合关系。热力学力是产生不可逆的原因，而热力学流则是对相应的热力学力的响应及所产生的效果。不同的不可逆过程具有相应的“力”和“流”。其实，各种不可逆过程之间存在着耦合或干涉，发生交叉效应，即一种“力”可以引起多种“流”，一种“流”也可以是多种“力”所产生的总的效果。例如浓度差除直接导致扩散流外，还引起热流，此即杜佛（Dufour）于1872年发现的扩散热效应，此外索瑞（Soret）1879年发现了热扩散效应，即温度差不仅直接引起热流，还导致扩散流，这种效应后来发展成为分离同位素的一种方法。于是一般可写做

$$J_l = \sum_k L_{lk} X_k \quad (l = 1,2,\cdots) \tag{1}$$

其中

$$L_{lk} = \left(\frac{\partial J_l}{\partial X_k}\right)_0 \quad (\text{“0”指平衡态}) \tag{2}$$

称为动力学系数或唯象系数，它是在线性区中由“力” X_k 引起“流” J_l 的效应强弱的量度。L_{lk} 当 $l=k$ 时称为自唯象系数；当 $l \neq k$ 时称为干涉系数或交叉系数，L_{lk} 遵从昂萨格倒易关系：$L_{lk}=L_{kl}$。化学反应中，“流”和力的关系一般是 $w \approx (1-\mathrm{e}^{-A/k_BT})$，在线性区，化学反应力很小，化学亲合势 $A \ll k_BT$，于是反应流 w 与反应力 A/T 呈线性关系：$w \approx A/k_BT$。对于仅有热传导和扩散过程情形，在线性区，则有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}_1 &= L_{11}\boldsymbol{X}_1 + L_{12}\boldsymbol{X}_2 \\ &= L_{11}\left(-\nabla\frac{\mu}{T}\right) + L_{12}\nabla\left(\frac{1}{T}\right), \\ \boldsymbol{J}_2 &= L_{21}\boldsymbol{X}_1 + L_{22}\boldsymbol{X}_2 \\ &= L_{21}\left(-\nabla\frac{\mu}{T}\right) + L_{22}\nabla\left(\frac{1}{T}\right) \end{aligned} \tag{3}$$

其中自唯象系数 L_{11}，L_{22} 描述通常的扩散和热传导过程，交叉系数 L_{12}，L_{21} 描述热扩散和扩散热效应。

唯象系数 phenomenological coefficient　见“线性唯象律”。

熵产生 entropy production　熵产生 d_iS 是系统熵的变化的一部分，是系统内出现不可逆过程的结果。对于任何系统，均有

$$\mathrm{d}_iS \geqslant 0 \tag{1}$$

当系统发生可逆变化或达到平衡时，式(1)取等号。若系统是孤立的，由于和外界没有能量和物质的交换，则熵的变化为

$$\mathrm{d}S = \mathrm{d}_i S \geqslant 0 \tag{2}$$

$\mathrm{d}_i S$ 的符号永远不可能是负的。用局域熵增率 Θ 表示熵产生率：

$$\frac{\mathrm{d}_i S}{\mathrm{d}t} = P = \int \Theta \mathrm{d}V,$$

$$\Theta \geqslant 0 \quad (\text{“}=\text{”：可逆过程}) \tag{3}$$

Θ 又称局域熵产生率，即单位时间、单位体积的熵产生，可表示为

$$\Theta = \sum_i J_i X_i \tag{4}$$

即“流” J_i 和“力” X_i 的乘积之和。若系统进行热传导、扩散和化学反应等三种不可逆过程时，则有

$$\Theta = \boldsymbol{J}_u \cdot \nabla\left(\frac{1}{T}\right) + \sum_j \boldsymbol{J}_j \cdot \nabla\left(-\frac{\mu_j}{T}\right) + \sum_\xi w_\xi \frac{A_\xi}{T} \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{J}_u$、$\boldsymbol{J}_j$ 和 w_ξ 是热力学流，又称广义通量，$\nabla\left(\frac{1}{T}\right)$、$\nabla\left(-\frac{\mu_j}{T}\right)$ 和 A_ξ/T 是热力学力，又称广义力，“流”和“力”可以是矢量，也可以是标量，但同一种“力”和“流”应同是标量或同是矢量。当系统平衡时，所有的“流”都等于零，一般情形下各种“力”也等于零。可见局域熵产生是由于系统内部的物性不均匀或偏离平衡的化学反应所引起的。

局域熵产生率 rate of local entropy production 见“熵产生”。

熵流 entropy flow 出现在系统同外界交换能量和物质的过程中，是系统熵的变化的一部分。熵流 $\mathrm{d}_e S$ 可为正、零或为负。若系统是孤立的，则 $\mathrm{d}_e S = 0$，而熵产生 $\mathrm{d}_i S \geqslant 0$，于是系统的熵的变化 $\mathrm{d}S = \mathrm{d}_e S + \mathrm{d}_i S \geqslant 0$，永远不会自发地形成有序状态。闭系在温度充分低时，可能形成稳定化的有序平衡结构。对于开系，当 $\mathrm{d}_e S < -\mathrm{d}_i S$ 时，系统的熵变 $\mathrm{d}S$ 就小于零。此时系统从外界获得负熵流，而熵减少，形成所谓有序化，可能出现稳定化的有序耗散结构。用熵流密度矢量 $\boldsymbol{J}_s$ 表示熵流的时间变率：

$$\frac{\mathrm{d}_e S}{\mathrm{d}t} = -\oint\!\!\oint \mathrm{d}\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{J}_s^{\Sigma} = -\int \operatorname{div} \boldsymbol{J}_s \mathrm{d}V \tag{1}$$

$\boldsymbol{J}_s$ 是单位时间内沿界面法线方向通过单位面积的熵，若系统内进行热传导、扩散和化学反应等过程，则有

$$\boldsymbol{J}_s = \frac{1}{T}\boldsymbol{J}_u - \sum_j \frac{\mu_j}{T}\boldsymbol{J}_j \tag{2}$$

可见，$\boldsymbol{J}_s$ 是扩散流密度矢量 $\boldsymbol{J}_j$ 和能量流密度矢量 $\boldsymbol{J}_u$ 的线性组合。

熵流密度 entropy flow density 见“熵流”。

熵平衡方程 entropy balance equation 如何寻求系统所发生的不可逆现象与熵产生间的联系是一个重要的问题，为此，首先利用局域平衡假设来建立熵平衡方程。将局域熵 $s_v = s_v(\{\rho_j(\boldsymbol{r}, t)\})$ 对时间求偏导，并应用平衡热力学公式 $\frac{\partial s_v}{\partial \rho_j} = -\mu_j/T$（$\rho_j$ 和 μ_j 分别是组元 j 的密度和化学势）及反应扩散方程 $\frac{\partial \rho_j}{\partial t} = -\operatorname{div}\boldsymbol{J}_j + \sum_\xi w_\xi \nu_{j\xi}$ $(j = 1, 2, \cdots, n)$，可以得到

$$\frac{\partial s_v}{\partial t} = -\operatorname{div}\boldsymbol{J}_s + \Theta \tag{1}$$

其中，引入了熵流密度矢量 $\boldsymbol{J}_s$ 及局域熵产生率 Θ：

$$-\operatorname{div}\boldsymbol{J}_s \equiv \operatorname{div}\left(\sum_j \frac{\mu_j}{T}\boldsymbol{J}_j\right) \tag{2}$$

$$\Theta = -\sum_j \boldsymbol{J}_j \cdot \nabla \frac{\mu_j}{T} + \sum_\xi \frac{A_\xi}{T} w_\xi \tag{3}$$

$A_\xi = -\sum_j \mu_j \nu_{j\xi}$ 是第 ξ 种化学反应的化学亲合势，用来测量由于化学反应而使状态离开平衡的程度，即表征进行化学反应的能力。描述局域量之间关系的式(1)称为熵平衡方程，它表明局域熵的时间变化率等于熵流密度的负散度与局域熵增率(即熵源)之和。式(1)对体积积分即得熵平衡方程另一形式

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial}{\partial t}\int s_v \mathrm{d}V = -\int \operatorname{div}\boldsymbol{J}_s \mathrm{d}V + \int \Theta \mathrm{d}V = \frac{\mathrm{d}_e S}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}_i S}{\mathrm{d}t} \tag{4}$$

式(4)表明,系统的熵随时间的变化率$\left(\frac{dS}{dt}\right)$是由熵流 d_eS 和熵产生 d_iS 的时间变率两者引起的。

化学亲和势 chemical affinity 见“熵平衡方程”。

熵的时间变率 time rate of change of entropy 见“熵平衡方程”。

反应扩散方程 reaction-diffusion equation 反应扩散系统各组元的密度$\{\rho_j\}$随时间演化的方程。根据质量守恒定律,第 j 种组元质量的时间变率由两部分组成:

$$\frac{dm_j}{dt}=\frac{d}{dt}\int\rho_j dV=\int\frac{\partial\rho_j}{\partial t}dV=\frac{d_em_j}{dt}+\frac{d_im_j}{dt} \tag{1}$$

式中右端第 1 项是组元 j 通过表面的扩散流,即

$$\frac{d_em_j}{dt}=-\oiint \boldsymbol{J}_j^{\Sigma}\cdot d\Sigma=-\int \mathrm{div}\boldsymbol{J}_j dV \tag{2}$$

其中 $\boldsymbol{J}_j=\rho_j\boldsymbol{v}_j$ 是扩散流密度矢量($\boldsymbol{v}_j$是组元 j 的速度),第 2 项

$$\frac{d_im_j}{dt}=\sum_{\xi=1}^{r}\nu_{j\xi}W_\xi=\sum_{\xi=1}^{r}\nu_{j\xi}\int w_\xi dV \tag{3}$$

是系统内 r 种化学反应所产生的组元 j 的质量变率,其中 $\nu_{j\xi}$是组元 j 在第 ξ 种化学反应中的化学计量系数,若组元 j 在反应式右方出现,$\nu_{j\xi}$取正号,在左方出现则取负号,w_ξ 称为第 ξ 种化学反应的反应率,它与 $\boldsymbol{J}_j$ 都是时间和坐标的函数。于是有

$$\frac{\partial\rho_j}{\partial t}=-\mathrm{div}\boldsymbol{J}_j+\sum_\xi\nu_{j\xi}w_\xi \tag{4}$$

$$(j=1,2,\cdots,n)$$

式(4)为一非线性偏微分方程组,是包含扩散类和化学反应类的非平衡系统的质量守恒方程。它表明,左端所代表的组元 j 的局域时间变率等于组元 j 的扩散流的负散度与代表产生(或湮灭)组元 j 的源项之和。若是稀薄媒质,则有 $\boldsymbol{J}_j=-D_j\nabla\rho_j$,并令 $g(\{\rho_j\})=\sum_\xi\nu_{j\xi}w_\xi$,于是式(4)变为下述形式

$$\frac{\partial\rho_j}{\partial t}=D_j\nabla^2\rho_j+g(\{\rho_j\}) \tag{5}$$

式(4)和(5)均称为反应扩散方程,若给出一定的边界条件,则可对它们的解进行讨论。

扩散流密度 diffusion current density 见“反应扩散方程”。

化学反应率 rate of chemical reaction 见“反应扩散方程”。

开系的定常态 steady state of open system 非平衡开系的熵的时间变率由两部分组成

$$\frac{dS}{dt}=\frac{d_eS}{dt}+\frac{d_iS}{dt} \tag{1}$$

式中 d_iS 是因内部的不可逆性而引起的熵产生,d_eS 是同外界交换物质与能量而出现的熵流。若系统在 dt 时间内总熵不变,$dS=0$,即系统处于一非平衡定常态时,应有

$$\frac{d_eS}{dt}=-\frac{d_iS}{dt} \tag{2}$$

因此,开系的定常态是熵流和熵产生两者的时间变率大小相等,但符号相反的一种状态。

最小熵产生定理 theorem of minimum entropy production 在线性非平衡区熵产生率 P 随时间演化所遵从的规律。设系统除处于局域平衡外,还处于力学平衡,不受外场影响,温度也不随时间变化,受到与时间无关的边界条件约束。可以求得

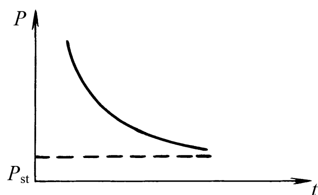
$$\frac{dP}{dt}=-\frac{2}{T}\int dV\sum_{j,k}\frac{\partial\mu_j}{\partial\rho_k}\frac{\partial\rho_j}{\partial t}\frac{\partial\rho_k}{\partial t} \tag{1}$$

其中 μ_j 和 ρ_j 分别是组元 j 的化学势和密度。系统的吉布斯函数为 $G=G(T,p,\{\rho_j\})=\int g_v dV$,处于局域平衡条件:局域吉布斯函数 g_v 取极小值,$\delta g_v=\sum_j\mu_j\delta\rho_j=0$,$\delta^2g_v=\sum_j\delta\rho_j\delta\mu_j=\sum_{j,k}\frac{\partial\mu_j}{\partial\rho_k}\delta\rho_j\delta\rho_k\geqslant 0$。于是有 $\sum_{j,k}\frac{\partial\mu_j}{\partial\rho_k}\frac{\partial\rho_j}{\partial t}\frac{\partial\rho_k}{\partial t}\geqslant 0$,故得最小熵产生定理

$$\frac{dP}{dt}\leqslant 0 \tag{2}$$

(“=”:定常态,“<”:离开定常态)

式(2)是由I.普里高金(I.Prigogine)于1945年证明的,它表明,处于线性非平衡区的系统随时间演变总是向着熵产生率减小的方向进行,直至定常态,熵产生率不再随时间变化,$\frac{dP}{dt}=0$,即有 $P_{st}=P_{\min}$,如图所示。系统随时间发展趋于定常态,即宏观参量$\{\rho_j\}$不随时间改变的近平衡态,即使有扰动时也是如此。可以得出结论:在线性非平衡区,不可能出现新的时空有序结构,即耗散结构不可能形成。



李雅普诺夫函数 Lyapunov function 熵产生率 $P=\frac{d_iS}{dt}\geqslant 0$,最小熵产生定理给出$\frac{dP}{dt}\leqslant 0$,根据李雅普诺夫稳定性理论,$P>0$,$\frac{dP}{dt}\leqslant 0$ 意味着系统是渐近稳定的,P 就是处于线性区的系统的李雅普诺夫函数。

推广的最小熵产生定理 generalized theorem of minimum entropy production 又称普遍演化判据。系统处于非线性区时,最小熵产生定理$\frac{dP}{dt}\leqslant 0$ 不再成立。但可将$\frac{dP}{dt}$分解为:

$$\frac{dP}{dt}=\frac{d}{dt}\int dV\left(\sum_l J_l X_l\right)$$
$$=\int dV\left(\sum_l J_l\frac{dX_l}{dt}\right)+\int dV\left(\sum_l\frac{dJ_l}{dt}X_l\right)$$
$$=\frac{d_XP}{dt}+\frac{d_JP}{dt} \tag{1}$$

其中$\frac{d_XP}{dt}$和$\frac{d_JP}{dt}$分别是由于"力"的变化和"流"的变化引起的熵产生率的时间变率。对于线性区,$\frac{d_XP}{dt}=\frac{d_JP}{dt}=\frac{1}{2}\frac{dP}{dt}\leqslant 0$,但在非线性区,$\frac{dP}{dt}\leqslant 0$ 并不存在,而

$$\frac{d_XP}{dt}\leqslant 0 \tag{2}$$

却是存在的,式(2)称为推广的最小熵产生定理。设系统处于局域平衡、力学平衡,且等温,不受外场影响,但受到与时间无关的边界条件的约束。系统内进行扩散、热传导和引起系统非线性效应的化学反应。可以证明

$$\frac{d_XP}{dt}=-\frac{1}{T}\int dV\left[\frac{1}{T}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial T}{\partial t}+\sum_{i,j}\frac{\partial\mu_i}{\partial\rho_j}\frac{\partial\rho_j}{\partial t}\frac{\partial\rho_i}{\partial t}\right]$$
$$\leqslant 0\quad(\text{“=”:定常态}) \tag{3}$$

式(3)或(2)对线性和非线性区均适用,其应用范围较线性区的最小熵产生定理为广。它可看做是热力学第二定律的推广。该定理对$\frac{dP}{dt}$、$\frac{d_JP}{dt}$符号没有限定。

超熵产生 excess entropy production 取远离平衡定常态为参考态,将扩散流$\{\boldsymbol{J}_i\}$、化学反应率$\{w_\xi\}$及化学亲合势$\{A_\xi\}$、化学势$\{\mu_i\}$、组元密度$\{\rho_j\}$在定常态展开,取至一级小量,它们的定常态值满足反应扩散方程,可求得因力引起的熵产生率的时间变率为

$$\frac{d_XP}{dt}=\frac{1}{T}\int dV\left[-\sum_i\delta\boldsymbol{J}_i\cdot\nabla\frac{\partial\delta\mu_i}{\partial t}+\sum_\xi\delta w_\xi\frac{\partial\delta A_\xi}{\partial t}\right]\leqslant 0 \tag{1}$$

因而有

$$d_XP=d_X\delta P=\int dV\sum_l\delta J_l\, d\delta X_l\leqslant 0 \tag{2}$$

式(2)表明,求 d_XP 就等于求 $d_X\delta P$,再作如下限制:$\left|\frac{\delta J_l}{J_l^0}\right|\ll 1$,$\left|\frac{\delta X_l}{X_l^0}\right|\ll 1$,$\delta J_l=\sum_{l'}L_{ll'}\delta X_{l'}$(一般 $L_{ll'}\neq L_{l'l}$),引入

$$\delta_XP=\int dV\sum_l\delta J_l\delta X_l \tag{3}$$

将 $J_l=J_l^0+\delta J_l$ 代入式(3),并利用定常态条件和边界条件(界面上无流存在),又可得到

$$\delta_XP=\int dV\sum_l J_l\delta X_l$$
$$=\int dV\sum_l\delta J_l\delta X_l \tag{4}$$

其中 δJ_l 和 δX_l 分别称为"超流"和"超力",而 δ_XP 称为超熵产生。还可找出 d_XP 的下述表示式

$$d_X P = d\left(\frac{1}{2}\delta_X P\right) + \int dV \sum_{ll'} L^a_{ll'} \delta X_l d\delta X_{l'} \leqslant 0 \quad (5)$$

式中 $L^a_{ll'} = \frac{L_{ll'} - L_{l'l}}{2}$ 是系数矩阵 $L_{ll'}$ 的反对称部分。可见超熵产生 $\delta_X P$ 与 $d_X P$ 是不同的。式(5)用来判定在一定条件下非线性系统的稳定性。

条件概率 conditional probability 随机变量 $\{a_i\}$ 的值取在 $\{a_i\}$ 到 $\{a_i + da_i\}$ 之间的概率为

$$P(\{a_i\}, t)\{da_i\} = \int_{\{a_i, a_i + da_i\}} \rho(\{\boldsymbol{r}_j\}, \{\boldsymbol{p}_j\}, t)\{d\boldsymbol{r}_j\}\{d\boldsymbol{p}_j\} \quad (1)$$

其中 $\{\boldsymbol{r}_j\}, \{\boldsymbol{p}_j\}$ $(j = 1, 2, \cdots, N)$ 是粒子的坐标和动量，$da_i = a_i - a_i^0$ 是宏观变量 a_i 对其参考态 a_i^0 的偏离，ρ 是概率密度。定义联合概率 $P_1(\{a_1\}, t_1)\{da_1\} \equiv \{a\}$ 在 t_1 时刻取值为 $\{a_1\}$ 到 $\{a_1 + da_1\}$ 的概率；$P_2(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2)\{da_1\}\{da_2\} \equiv \{a\}$ 在 t_1 时刻取值为 $\{a_1\}$ 到 $\{a_1 + da_1\}$，而 t_2 时取值 $\{a_2\}$ 到 $\{a_2 + da_2\}$ 的联合概率；… $P_n(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2; \cdots; \{a_n\}, t_n)\{da_1\}\{da_2\}\cdots\{da_n\} \equiv \{a\}$ 在 t_1 时取值为 $\{a_1\}$ 到 $\{a_1 + da_1\}$，t_2 时取值为 $\{a_2\}$ 到 $\{a_2 + da_2\}$，…，t_n 时取值 $\{a_n\}$ 到 $\{a_n + da_n\}$ 的联合概率。它们满足归一化条件。式中 $\{a_1\}, \{a_2\}, \cdots, \{a_k\}$ 依次代表 $\{a_{1j}\}, \{a_{2j}\}, \cdots, \{a_{kj}\}$，$\{a_n\}$ 代表 $\{a_{nj}\}$。时序 $t_1, t_2, \cdots, t_k$ 按正顺序或逆顺序表示时间的先后。定义条件概率 $W_1(\{a\}, t) = P_1(\{a\}, t)$，$W_2(\{a_1\}, t_1 | \{a_2\}, t_2) \equiv t_1$ 时刻已给定 $\{a\} = \{a_1\}$，而 t_2 时刻 $\{a\}$ 取 $\{a_2\}$ 的概率。根据概率论，显然有

$$P_2(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2) = W_2(\{a_1\}, t_1 | \{a_2\}, t_2) \cdot P_1(\{a_1\}, t_1) \quad (2)$$

$$\sum_{\{a_2\}} W_2(\{a_1\}, t_1 | \{a_2\}, t_2) = 1 \quad (3)$$

$W_1, W_3, \cdots$ 也像 W_2 那样满足归一化条件式(3)。对于处在近平衡线性区的系统，W 遵从爱因斯坦涨落公式。

联合概率 joint probability 见“条件概率”。

二项式分布 binomial distribution 考虑 N 个理想气体分子封闭在体积为 V 的容器中，当气体处于热平衡时，在 V 中划出一部分 $v < V$，从 N 个分子中分出 n 个分子在 v 中，其余在 $V - v$ 中。则 v 中出现 n 个分子(不问是哪 n 个分子)的概率为

$$W_N(n) = \frac{N!}{(N-n)!\,n!} p^n q^{N-n} = C_N^n p^n q^{N-n} \quad (1)$$

式中 p 是一个分子出现在体积 v 中的概率，此分子出现在 $V - v$ 中的概率是 $q = 1 - p$，式(1)正好是二项式 $(p + q)^N$ 的展开式的公项，故称二项式分布式。随机变量 n 的概率分布是满足归一化条件的。n 的平均值和均方涨落分别为

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{N} n W_N(n) = Np \quad (2)$$

$$\overline{(\Delta n)^2} = \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n}(1 - p) = Npq \quad (3)$$

在 $\frac{v}{V} \to 0$ 及热力学极限 $V \to \infty$，$N \to \infty$，$\frac{N}{V} =$ 常数的条件下，式(1)趋于泊松分布

$$W_n(n) = \frac{(\bar{n})^n}{n!} e^{-\bar{n}} \quad (4)$$

在 $N \gg 1$，$p = q = \frac{1}{2}$ 条件下，式(1)趋于高斯分布(或正态分布)

$$W_N(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{(\Delta n)^2}}} e^{-(n-\bar{n})^2 / 2\overline{(\Delta n)^2}} \quad (5)$$

泊松分布 Poisson distribution 见“二项式分布”。

高斯(或正态)分布 Gaussian (or normally) distribution 见“二项式分布”。

马尔可夫过程 Markovian process 物理过程大多是马尔可夫过程，即使有些过程是非马尔可夫的，也可转换成马尔可夫过程来处理。根据概率论，在时刻 $t_1, t_2, \cdots, t_{n-1}$，$\{a_i\}$ 取值 $\{a_1\}, \{a_2\}, \cdots, \{a_{n-1}\}$，而在 t_n 时刻 $\{a_i\} = \{a_n\}$ 的概率应为

$$W_n(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2; \cdots; \{a_{n-1}\}, t_{n-1} | \{a_n\}, t_n) = \frac{P_n(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2, \cdots, \{a_n\}, t_n)}{P_{n-1}(\{a_1\}, t_1; \{a_2\}, t_2; \cdots; \{a_{n-1}\}, t_{n-1})} \quad (1)$$

式中 P_n 是联合概率，W_n 为该过程的条件概率。若下式

$$W_n(\{a_1\},t_1;\cdots;\{a_{n-1}\},t_{n-1}|\{a_n\},t_n)$$
$$= W_2(\{a_{n-1}\},t_{n-1}|\{a_n\},t_n) \qquad (2)$$

成立，则此过程称为马尔可夫过程。式(2)表明，它包含了过程所有必须的信息，t_n 时刻 $\{a_i\}=\{a_n\}$ 的概率仅与 t_{n-1} 时刻的概率分布有关，而与 t_{n-1} 时刻之前的任何概率均无关系，换言之，马尔可夫过程是失去了记忆，只有前一步可以影响后一步的过程。布朗运动，自催化反应等均属此例。但像生态演化，物种遗传等有长时间相关的有记忆的过程，则不是马尔可夫过程。一系列的马尔可夫过程组成马尔可夫链。若条件概率 $W(\{a_1\},t_1|\{a_2\},t_2)$ 仅与时间间隔 $t=t_2-t_1$ 有关，而与 t_1,t_2 的取值无关，则称此过程为平稳的马尔可夫过程。容易得到联合概率 P_2 遵从的查普曼-科尔莫戈罗夫方程

$$\begin{aligned} &P_2(\{a_1\},t_1;\{a_2\},t_1+t)\\ =\ &W_2(\{a_1\},t_1\,\big|\,\{a_2\},t_1+t)\cdot P_1(\{a_1\},t)\\ =\ &P_1(\{a_1\})\sum_{\{a'\}}W_2(\{a_1\}\,\big|\,\{a'\},\tau)\\ &\cdot W_2(\{a'\},\tau\,\big|\,\{a_2\},t)\\ =\ &\sum_{\{a'\}}W_2(\{a'\}\,\big|\,\{a_2\},t-\tau)\\ &\cdot P_2(\{a_1\};\{a'\},\tau) \end{aligned} \qquad (3)$$

$\left(0\leqslant\tau\leqslant t,\ \sum_{\{a'\}}\text{是对所有可能的中间态求和}\right)$

式(3)是一非线性方程。还可写出

$$W_2(\{a'\}|\{a_2\},t-\tau)=\frac{P_2(\{a'\};\{a_2\},t-\tau)}{P_1(\{a'\},\tau)} \qquad (4)$$

式(2)右端条件概率 $W_2(\{a_{n-1}\},t_{n-1}|\{a_n\},t_n)$ 又称为跃迁概率或转移概率。为方便起见，令 $l\equiv\{a_l\}$，$m\equiv\{a_m\}$，$\tau=t_2-t_1$，平稳的马尔可夫过程的跃迁概率 $W_2(\{a_l\},t_1|\{a_m\},t_2)$ 就可记为 $W_2(l|m,\tau)=W_{lm}$，现定义一个描述态之间跃迁快慢的量 w_{lm}：

$$w_{lm}=\lim_{\tau\to0}\frac{W_2(l|m,\tau)}{\tau}\ (l\neq m) \qquad (5)$$

它是从 l 态到 m 态的跃迁速率或单位时间的跃迁概率。显然 $w_{lm}\geqslant0$，可用 w_{ll} 形式表示从 l 态到 l 态的跃迁速率，但是有实际意义的是

$$\begin{aligned} -w_{ll}&=\lim_{\tau\to0}\sum_{m\neq l}W_2(l\mid m,\tau)/\tau\\ &=\lim_{\tau\to0}\frac{1-W_2(l\mid l,\tau)}{\tau} \end{aligned} \qquad (6)$$

它表示从 l 态到其他任意一个态的跃迁速率，其中利用了 W_2 的归一化条件 $\sum_m W_2(l\mid m,\tau)=1$。显然 $w_{ll}\leqslant0$。式(6)可写做

$$-w_{ll}=\sum_{m\neq l}w_{lm}\quad\text{或}\quad\sum_m w_{lm}=0 \qquad (7)$$

值得注意，W 与 P 不同，W 表示从一个态跃迁到另一个态的概率，是对过程而言的，而 P 则表示某一宏观态出现的概率，是对系统的宏观状态而言的。

查普曼-科尔莫戈罗夫过程 Chapman-Kolmogorov equation 见“马尔可夫过程”。

跃迁概率 transition probability 见“马尔可夫过程”。

跃迁速率 transition speed 见“马尔可夫过程”。

主方程 master equation 系统宏观态 $\{a_l\}\equiv l$ 出现的概率 P 随时间演化所遵循的方程，由泡利(Pauli)最早提出。由下式

$$P(l,t)=\sum_m W_2(m,t'\mid l,t)P(m,t) \qquad (1)$$

(式中 W_2 是条件概率)即可导出主方程

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}P(l,t)}{\mathrm{d}t}&=\lim_{\tau\to0}\frac{P(l,t+\tau)-P(l,t)}{\tau}\\ &=\sum_m w_{ml}P(m,t)\\ &=\sum_{m\neq l}[w_{ml}P(m,t)-P(l,t)w_{lm}] \end{aligned} \qquad (2)$$

其中利用了关系式 $w_{ll}=-\sum_{m\neq l}w_{lm}$，$w_{lm}$ 是跃迁速率。可运用由式(2)导出 $\{a\}$ 的各次矩随时间演化所遵循的方程来求涨落的大小及其规律。许多物理问题如布朗运动，固体辐射效应乃至光合作用都可从主方程出发展开讨论。主方程对研究平衡和非平衡问题都是有效的方法，它揭示了微观可逆性与宏观不可逆性之间的关系，并可给出趋向平衡的细致描述。普

里高金于 1971 年至 1977 年将主方程用于耗散结构问题，先后采用生灭过程、相空间及非线性三种形式的主方程讨论涨落与耗散结构，获得关于耗散结构形成机制的解释，以及计算怎样由涨落触发耗散结构等结果。

葛兰斯多夫-普里高金判据 Glansdorff-Prigogine Criteria　非线性系统稳定性判据，简称 $G-P$ 判据。将熵 S 按定常态展开，于是有下述关系

$$\delta S=-\frac{1}{T}\int \mathrm{d}V\sum_i \mu_i^0 \delta\rho_i,$$

$$\delta^2 S=-\frac{1}{T}\int \mathrm{d}V\sum_{i,j}\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \rho_j}\right)_0 \delta\rho_i \delta\rho_j \tag{1}$$

其中 ρ_i 和 μ_i 是组元 i 的密度和化学势，角标表示定常态的值，局域平衡条件给出 $\delta^2 S\leqslant 0$，故得到下述不等式

$$\delta^2 S=-\frac{1}{T}\int \mathrm{d}V\sum_{i,j}\left(\frac{\partial \mu_i}{\partial \rho_j}\right)_0 \delta\rho_i \delta\rho_j \leqslant 0 \tag{2}$$

将式(2)对时间求导，可以求得超熵判据公式

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}(\delta^2 S)&=\int \mathrm{d}V\left[-\sum_i \boldsymbol{J}_i\cdot\delta\left(\nabla\frac{\mu_i}{T}\right)+\sum_\xi \delta w_\xi \delta\frac{A_\xi}{T}\right]\\&=\int \mathrm{d}V\sum_l \delta J_l \delta X_l\\&=\delta_X P\end{aligned} \tag{3}$$

式中 $A_\xi=-\sum_j \mu_j \nu_{j\xi}$ 是化学亲合势，w_ξ 为化学反应率。式(3)表明，$\frac{1}{2}\delta^2 S$ 的时间导数正好是超熵产生 $\delta_X P$。$\delta_X P$ 的符号可正可负，也可为零，相应地 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\delta^2 S\right)$ 也有各种可能的符号。可将 $\delta^2 S$ 选作非线性系统的对应于反应扩散方程的李雅普诺夫函数。由式(2)和(3)得 $G-P$ 判据为

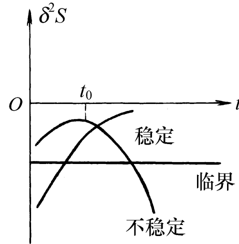
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\delta^2 S\right)>0\quad 系统稳定,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\delta^2 S\right)<0\quad 系统不稳定,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{1}{2}\delta^2 S\right)=0\quad 临界状况 \tag{4}$$

$\delta_X P>0$，系统稳定；$\delta_X P<0$，系统不稳定；$\delta_X P(\lambda_c)=0$，临界条件　(4 a)

可知超熵产生 $\delta_X P$ 是非线性系统稳定性的热力学判据。当 $\delta_X P<0$ 时，状态失稳，可能出现新的稳定的有序结构，即耗散结构。$\delta^2 S$ 随时间 t 变化的稳定、不稳定及临界三种情形如图所示。



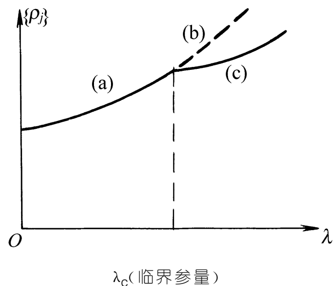
超熵判据公式 excess entropy criteria formula　见“葛兰斯多夫-普里高金判据”。

非线性系统的李雅普诺夫函数 Lyapunov function of nonlinear system　见“葛兰斯多夫-普里高金判据”。

远离平衡时的分支现象 branching phenomena far from equilibrium　非线性系统各组元密度遵从反应扩散方程

$$\frac{\partial \rho_j}{\partial t}=-\operatorname{div}\boldsymbol{J}_j+\sum_\xi \nu_{j\xi} w_\xi \quad (j=1,2,\cdots,n) \tag{1}$$

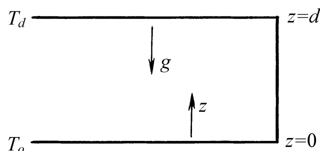
其解的多样性用分支现象的语言和方法来描述比较简明方便。如图所示，设想由于某个外参量 λ(例如边界上某种梯度，化学亲合势等)



λ_c(临界参量)

的增长，使系统离开平衡，态参量$\{\rho_j\}$将发生变化。图中(a)表示热力学分支，它是由一系列的处于线性区的非平衡定常态(包括开始时的平衡态)所组成的分支，它们都是稳定的，但λ超过某一临界值λ_c时，热力学分支就变得不稳定，此时扰动或涨落可使系统离开这个分支进入到新的稳定的状态。虚的曲线(b)代表不稳定部分。曲线(c)表示新解，它是由一系列新的有序结构的状态构成的。发现在λ增长、定常态失稳、自动有序之间有着深刻的联系。在热力学分支的不稳定之上呈现的有序结构称为耗散结构。从热力学分支在λ_c处状态失稳到有序化的过程称为非平衡相变，也称为"自组织现象"。可以得出结论：远离平衡的非线性是有序之源。

贝纳特不稳定性 Bénard instability 非平衡相变的典型例子，法国人贝纳特于1900年首先进行了实验研究。如图所示，在两个很大的水平板之间满贮静止的流体，它处于重力场中，若对下板加热，沿板的垂直方向出现温度梯度，并改变黏滞性和热导率。若温度梯度小



于某一特征值时，则进行通常的导热，但当大到某一数值时，发现处于静止状态流体的一些点变得不稳定。当下层流体热膨胀产生的浮力超过黏滞力时，流体便分成许许多多对流元胞，它们在空间周期地出现。每个元胞中，流体的一部分上升，另一部分下降，流体的环流在元胞中重复着。元胞的图样决定于容器的形状。这种非平衡相变是由平滑的定常态失稳向湍流态的一种转变。随着温度的继续升高，对流花样还可发生多次分叉，其中包括到达混沌态的分叉甚至到达湍流的分叉。计算给出瑞利数本征值方程及临界值分别为

$$R=\frac{(n^2\pi^2+\beta^2)^3}{\beta^2}(n=1,2,\cdots,\infty),$$

$$R_c=\frac{27}{4}\pi^4=657.51$$

式中β是与元胞在x和y方向的大小有关的参数。

洛特卡-沃尔泰拉模型 Lotka-Volterra model 又称为捕食者-被捕食者或弱肉强食模型。可用动力学理论做较简单地讨论。考虑一小池内有被捕食者——A类小鱼，只吃草，覆盖池底的草数量不限；捕食者——B类大鱼，只吃小鱼，不吃草。任何时刻，一个B鱼碰上一个A鱼，把它吃掉，将使B类鱼数增1，而A类鱼数减1。两类鱼的运动方程为

$$\frac{d\rho_A}{dt}=\lambda_A\rho_A-\varepsilon_A\rho_A\rho_B,$$

$$\frac{d\rho_B}{dt}=-\lambda_B\rho_B+\varepsilon_B\rho_A\rho_B \tag{1}$$

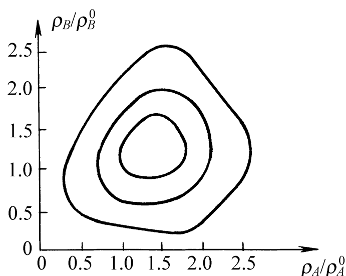
这是非线性方程，它们的定常态解，即那些使群体保持不随时间变化的ρ_A和ρ_B值为

$$\begin{cases}\rho_A^0=0\\ \rho_B^0=0\end{cases}\quad\begin{cases}\rho_A^0=\lambda_B/\varepsilon_B\\ \rho_B^0=\lambda_A/\varepsilon_A\end{cases} \tag{2}$$

即一个定常态解出现在两种群体为零值的原点，另一个出现在两种群体为有限值时。为考察定常态的稳定性，令$\rho_A=\rho_A^0+x_A$，$\rho_B=\rho_B^0+x_B$，代入式(1)得到关于x_A和x_B的线性方程，发现原点的定常态是不稳定的，并对应一个鞍点或双曲线的固定点，而对应于非零定常态的x_A，x_B方程矩阵的本征值具有$\pm i\sqrt{\lambda_A\lambda_B}$的形式，这个定常态是一个中心。可以得出

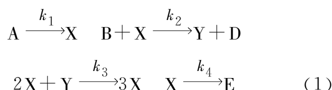
$$\lambda_B\ln\rho_A+\lambda_A\ln\rho_B-\varepsilon_A\rho_B-\varepsilon_B\rho_A=\mathrm{const} \tag{3}$$

由式(3)可确定相平面的结构。可看出，群体围绕定常态振荡。然而，若$\rho_A=0$，那么$\rho_B\to$



0,大鱼消失;当 $\rho_B=0$ 时,则 $\rho_A\to\infty$,小鱼的数目将按指数的规律增长(见图)。

布鲁塞尔机 Brusselator 非线性化学系统中最简单的模型之一。它包括六个不同的组元,其中两个(X,Y)的浓度可随时间和空间变化,其他四个(A,B,D,E)的浓度是固定的,只允许反应沿一个方向进行,因而保持远离平衡。化学反应分为四步进行:



$$A\xrightarrow{k_1}X\quad B+X\xrightarrow{k_2}Y+D$$

$$2X+Y\xrightarrow{k_3}3X\quad X\xrightarrow{k_4}E \tag{1}$$

组元 A,B 过量,D,E 一出现就移去。作变数变换

$$t=k_4t',\ X=\left(\frac{k_3}{k_4}\right)^{1/2}\rho_X,\ Y=\left(\frac{k_3}{k_4}\right)^{1/2}\rho_Y,\ A=\left(\frac{k_1^2k_3}{k_4^3}\right)^{1/2}\rho_A,\ B=\left(\frac{k_2}{k_4}\right)\rho_B \text{ 及 } D_i=D'_i/k_4,$$

这里 ρ_j 代表各组元的浓度,D'_i是扩散系数,于是反应扩散方程可写做

$$\frac{\partial X}{\partial t}=A-(B+1)X+X^2Y+D_1\nabla^2X$$

$$\frac{\partial Y}{\partial t}=BX-X^2Y+D_2\nabla^2Y \tag{2}$$

方程(2)具有均匀定常态解

$$X_0=A,\ Y_0=B/A \tag{3}$$

它是当式(1)逆反应允许发生、在化学平衡时出现的定常态解在远离平衡条件下的延续。即这定常态是属于定常态解的热力学分支的。应寻求热力学分支变得不稳定,可能出现时间、空间振荡的态转变的分叉条件。为此,必须规定系统的边界条件:①浓度 X 和 Y 在边界上取常数值,即 $X_b=A$ 及 $Y_b=B/A$;②在边界上,不存在垂直于表面的 X 和 Y 的流,即 $\boldsymbol{n}\cdot\nabla X=\boldsymbol{n}\cdot\nabla Y=0$,$\boldsymbol{n}$ 沿边界法线方向。利用线性稳定性理论考察定常态解(3)的不稳定性,设 $x(\boldsymbol{r},t)$、$y(\boldsymbol{r},t)$为对此定常态小的扰动,则有

$$X(\boldsymbol{r},t)=A+x(\boldsymbol{r},t),$$

$$Y(\boldsymbol{r},t)=\frac{B}{A}+y(\boldsymbol{r},t) \tag{4}$$

将式(4)代入式(2),略去非线性项,便可得到

$$\frac{\partial x}{\partial t}=(B-1)x+A^2y+D_1\nabla^2x,$$

$$\frac{\partial y}{\partial t}=-Bx-A^2y+D_2\nabla^2y \tag{5}$$

利用边界条件①和②则分别有简正模

$$\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\sin\frac{n\pi r}{L}\\C_2\sin\frac{n\pi r}{L}\end{pmatrix}e^{\omega_n t},$$

$$\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_1\cos\frac{n\pi r}{L}\\C_2\cos\frac{n\pi r}{L}\end{pmatrix}e^{\omega_n t}$$

$$(n=1,2,3,\cdots) \tag{6}$$

不难求得 ω 的本征值为

$$\omega_n=\frac{1}{2}(T\pm\sqrt{T^2-4\Delta}) \tag{7}$$

$$T=B-\left(1+A^2+\frac{D_1n^2\pi^2}{L^2}+\frac{D_2n^2\pi^2}{L^2}\right),$$

$$\Delta=\left(\frac{D_2n^2\pi^2}{L^2}+A^2\right)\left(\frac{D_1n^2\pi^2}{L^2}+1\right)-\frac{BD_2n^2\pi^2}{L^2} \tag{8}$$

可见,ω_n 与 A、B、D_1 及 D_2 有关,它可以是实数,也可以是复数,而实部可正可负。(1) ω_n 为实数的情形。ω_n 将是正的。此时,只有空间的振荡而不存在时间的振荡。图 1 给出关于 X

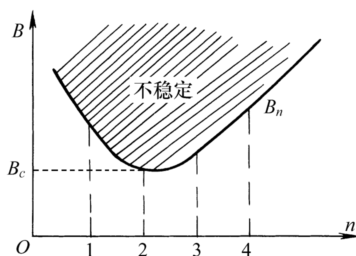


图 1 与时间无关耗散结构的稳定性图解

和 Y 浓度与时间无关的空间振荡的线性稳定性解,其中曲线是 $B_{n'}$分支首先出现在 $B=B_c$ 处,这里 B_c 是与 n 的一整数值对应的 B 的最低值。对于参数 A,B,D_1,D_2 和 L 的一组特

殊的值，可能发生向一新的空间振荡态转变的

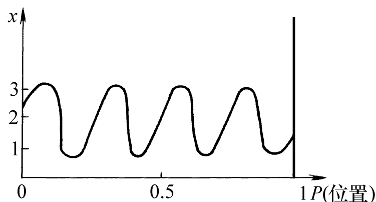


图 2　定常态的空间耗散结构

分叉现象。图 2 给出一个一维的例子，图中所表示的是一个浓度 X 作为位置 P 函数的振荡态。(2) ω_n 为复数的情形。小的扰动 x, y 将以 ω_n 的虚部给出的频率围绕定常态(式(3))振荡。ω_n 的实部决定定常态对于扰动是否稳定。若 ω_n 的实部是负的，扰动将会衰减，因此，定常态对于 ω_n 的涨落是稳定的。若 ω_n 的实部是正的，扰动呈指数增长，此时可能出现一个分叉或发生相变。对于边界条件②的情形，可有 $n=0$，因而存在 X 和 Y 的相对浓度空间上均匀，但随时间振荡(即化学钟)的可能性。对于一切 n 取有限值情形，则可能出现时间上和空间上都发生变化而呈现波动的新态。图 3 给出关于转变到依赖于时间的新态的线性稳定性图解。图 4 表示一维系统既随时间又随空间振荡的态的计算机模拟结果。在二维情形下，计算机模拟证明了行波的存在。以上所述的空间变化的定常态、瞬时振荡的均匀态和非线性行波在化学反应系统中都已观察到，这些态是稳定的远离平衡状态，普里高金称之为耗散结构。

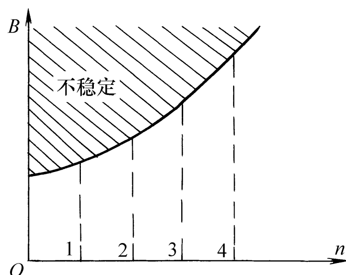


图 3　与时间有关的耗散结构的线性稳定性图解

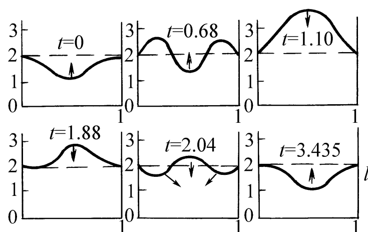


图 4　边界上浓度固定条件下，时间和空间耗散结构的一个系列

分形 fractal　具有分数维数的集合称为分形，其特征是：几何上的局部同整体相似，或者说，在标度变换下有着自相似性。(1)康托尔(Cantor)集合。它是分形的一个最简单的经典



康托尔集合例图

例子。取一(0,1)线段，将它像上图那样三等分，去掉中间的一段，然后把剩下的两段再三等分并都去掉中间的一段，这样一步一步地无穷继续下去，在极限情况下获得一点集，称为康托尔集合。1919 年 Hausdorff 引入广义的维数 D，其定义是：若把“规整”的几何对象的线段沿每个空间方向增到 l 倍，体积就增大到 $k=l^D$ 倍，则有

$$D=\frac{\ln k}{\ln l} \tag{1}$$

显然，D 可以是非整数。康托尔集合的维数应为 $D=\frac{\ln 2}{\ln 3}=0.6309\cdots$。这种集合作为一种基本对象常出现在许多更为复杂的有着无穷自相似层次的几何结构的一些截面之中。(2)分形的维数。考虑以 d 维的格子覆盖空间，设 $M(\varepsilon)$ 为含有空间点集 $\{\boldsymbol{x}_i\}_{i=1}^{N}$ 元素的格子数，并设其中第 k 个格子有 N_k 个点，定义 $p_k=N_k/N$。利用这些量定义三种维数，即 Hausdorff 维数(或相似维数)D、信息维数 σ 和相关维数 ν：

$$D=-\lim_{\varepsilon\to 0}\lim_{N\to\infty}\ln M(\varepsilon)/\ln\varepsilon \quad (2)$$

$$\sigma=-\lim_{\varepsilon\to 0}\lim_{N\to\infty}S(\varepsilon)/\ln\varepsilon,$$

$$S(\varepsilon)=-\sum_{k=1}^{M(\varepsilon)}p_k\ln p_k\ (\text{信息熵}) \quad (3)$$

$$\nu=\lim_{\varepsilon\to 0}\lim_{N\to\infty}\ln C(\varepsilon)/\ln\varepsilon,$$

$$C(\varepsilon)=\frac{1}{N^2}\sum_{i\neq j}\theta(\varepsilon-|\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_j|)$$

（相关积分）　(4)

其中 $\theta(x)=\begin{cases}1, & x>0\\ 0, & x<0\end{cases}$ 为 Heaviside 函数。对于一般的分形，这三个维数是不相同的。非线性物理研究的对象是各种复杂的分形物理和奇异集合，例如混沌动力系统的奇怪吸引子，处于临界点的 Ising 自旋的位形等，因此，分形理论与非线性物理关系十分密切，应用非常广泛。

康托尔集合 Cantor set　见“分形”。

分形的维数 fractal dimensions　见“分形”。

混沌 chaos　混沌运动是确定性系统中局限于有限相空间的高度不稳定的运动。这里所说的高度不稳定是指近邻的轨道随时间按指数规律分离，从而导致系统的长时间行为的某种混乱性。对时间的或相空间的粗粒平均显现出典型的随机行为。一个最简单的例子是由描述昆虫数目世代变化的 Logistic 方程经适当变换而得到的方程

$$x_{n+1}=1-2x_n^2 \quad (1)$$

式(1)所描述的一维非线性映像称为 Ulam-von Neumann 映像，其李雅普诺夫指数为 $\lambda=\ln 2>0$，说明这种映像的轨道是不稳定的，是一种混沌运动。又如洛伦兹方程

$$\dot{x}=\sigma(y-x),\ \dot{y}=rx-y-xz,\ \dot{z}=xy-bz$$

（x：速度模，y：温度模，z：温度梯度模；σ，r，b 均是正的常数）　(2)

它在参数空间一定范围内显示出对初始条件极其敏感，并给出非周期的“混乱”的输出，这就是混沌现象。自然界存在的大部分运动都是混沌运动。保守系统中的不可积性意味着混沌运动。开放系统的最简单的耗散结构是一种周期运动，它可用极限环来描述，两个或两个以上的周期运动相互耦合导致混沌运动。因此，存在耗散结构的系统，当其非线性进一步增强时，通常都会产生混沌运动。任何实际的宏观系统都是耗散系统，故对耗散系统中混沌的研究具有重要的理论和实际意义，特别是对解决湍流这个难题有根本意义。对耗散系统混沌的研究主要是对奇怪吸引子的研究。一个远离平衡的系统发生突变时，可能变到更为有序的状态，也可能进入混沌状态。混沌并非等同于无序或混乱，而只是无周期性和对称性，但又呈现丰富的内部层次的“有序”状态。混沌运动具有以下特征：它是非线性系统中具有内在随机性的表现形式；有连续的功率谱；有自相似结构和分数维数。

奇怪吸引子 strange attractors　对于耗散系统，相空间中不同初始条件的轨道最终会趋于同一轨道或少数几个轨道的集合。这样一些极限集合称为吸引子。系统的运动在 $t\to\infty$ 极限条件下，收缩到吸引子上。吸引子的维数低于原始相空间的维数。奇怪吸引子是对初始条件高度敏感即当其流域中两个相邻点之间的距离呈指数增大的吸引子，是一种整体稳定局部不稳定的运动状态，它具有层次结构及大于零的非整数维数。典型的例子有洛伦兹吸引子和埃农吸引子。前者是洛伦兹(Lorentz)1963 年提出的一个自治常微分方程组的模型

$$\dot{x}=-\sigma(x-y),\ \dot{y}=rx-y-xz,\ \dot{z}=xy-bz$$

（σ，r，b 均是正的常数）　(1)

后者是埃农(Hénon)1976 年在埃农映象

$$x_{n+1}=1-ax_n^2+y_n,\ y_{n+1}=bx_n$$

（a 和 $|b|\leqslant 1$ 是外部参数）　(2)

中发现的。具有正的李雅普诺夫(Lyapunov)指数，也即对初始条件高度敏感的吸引子称为混沌吸引子，它往往具有非整数维数，因而往往是奇怪吸引子。故称混沌吸引子为奇怪吸引子。

地磁场运动中的混沌现象 chaos phenomena in geomagnetic field motion　地球内部物质与电荷的经向及纬向的两种运动的耦合使地磁场不断地、无规则地改换极性。经向运动产生纬向磁场，纬向运动产生经向磁场。两个方向的磁场和两个方向的运动的相互作用将会导致混沌运动。这种相互作用可用以下方程组

$$I_0 \frac{d\omega_i}{dt} = T - MI_iI_j,$$

$$L \frac{dI_i}{dt} = -RI_i + M\omega_iI_j \quad (i, j = 1, 2, 同一式中 i \neq j) \qquad (1)$$

进行模拟。式中 I 为电流，ω_i 为角速度，I_0 是转动惯量，T 是转矩，L 和 M 分别为自感和互感。计算结果表明，式(1)确有混沌行为的解。

约瑟夫森结中的混沌运动 chaos motion in Josephson junction 在微波作用下的约瑟夫森结中发现了相当于温度为 5×10^4K 的宽带噪声，普遍认为这不是热噪声，而是混沌现象。结的电路方程为

$$C\frac{dU}{dt} + \frac{U}{R} + I_c\sin\varphi = I_{rf}\cos\omega t$$

或

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{\tau}\frac{d\varphi}{dt} + \omega_0^2\sin\varphi = \frac{2e}{\hbar c}I_{rf}\cos\omega t \qquad (1)$$

式中 U 是结上的电压，它由式 $\frac{d\varphi}{dt} = 2eU/\hbar$ 给出，φ 是结的相位差，C 为结电容，R 为正常态电阻，ω 是射频频率，I_c 和 I_{rf} 分别为临界电流和射频电流，$\tau = RC$，$\omega_0 = (2eI_c/\hbar c)^{1/2}$。式(1)中第 2 式与强迫阻尼摆的方程完全相同。它是具有宽带功率谱的混沌运动。

贝洛索夫-扎博廷斯基反应中的混沌现象 chaos phenomena in Belousov-Zhabotinsky reaction 是用四价-三价铈离子(Ce^{4+}/Ce^{3+})偶联催化的柠檬酸被溴酸钾氧化的反应。它含 20 个反应过程，其一简化模型是 9 种中间样品的 9 步反应。此实验是在带有搅拌装置的连续反应器中进行的。通过不断供给和移去某些反应物与生成物，使化学反应系统维持在非平衡定常态。可用耦合的非线性微分方程组来模拟反应。把流率选作控制参数，当温度、搅拌率和相对浓度固定时，反应物的流率是变化的。对于适当的流率，可以观察到各种花样，例如各种化学振荡、倍周期分岔、阵发混沌及周期和混沌交替出现等等。实验证明，这些动力学行为的确是由化学反应而非物质流动产生的。

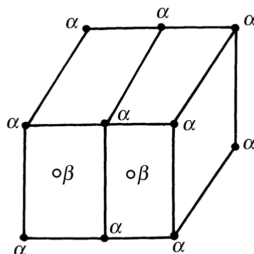
量子混沌 quantum chaos 量子混沌相对耗散系统混沌和保守系统混沌来说要“年轻得多”，但这个比较新的领域越来越引起人们的重视和兴趣。量子混沌与经典混沌“性格”迥异，有着千差万别。由量子力学基本原理可知，占有相空间有限体积的系统不可能有混沌运动。只有具有连续谱的系统才有可能出现混沌运动，这就是说只有无限系统、可作经典近似或准经典近似的系统才可能有混沌运动。自由度大于 1 的少自由度系统高激发态可能发生混沌现象。量子标准映象研究结果表明，量子效应显著的少自由度系统不会出现混沌；具有经典混沌的量子系统在准经典近似下有量子混沌，系统的能级间距遵从维格纳(Wigner)分布

$$P(u) = \frac{\pi u}{2d^2}\exp(-\pi u^2/4d^2) \quad u \geqslant 0 \quad (1)$$

式中 d 是能级的平均间距。式(1)表明系统具有高斯正交系综(GOE)的性质，而这个性质可以作为量子混沌是否充分的判据。经典混沌运动是不稳定的，量子混沌运动则是稳定的，它只是系统不可积性的表现。

七、相变和临界现象
Phase Transition and Critical Phenomena

有序-无序转变 order-disorder transitions 是真实的物理问题，对于合金来说，它是普遍现象。现以二元合金 ZnCu 为例作一简单介绍。ZnCu合金由两套立方格子构成(见图)，布



拉格衍射实验证明，当温度大于临界温度即 $T > T_c$ 时，有 Zn 占 α 位的概率 = Cu 占 α 位的概

率，Zn 占 β 位的概率＝Cu 占 β 位的概率；当 $T<T_c$ 时，Zn 占 α 位的概率≠Cu 占 α 位的概率，Zn 占 β 位的概率≠Cu 占 β 位的概率，Zn 占 α 位的概率＝Cu 占 β 位的概率。当 $T\to T_c$ 时，比热容 $C\to\infty$。可见，当 $T<T_c$ 时，不同原子的占位是有序的；当温度升高时，这种占位的有序化逐渐被破坏；当 $T>T_c$ 时，有序化完全被破坏，每个格点对于各种原子来说都是等价的，占位是随机的。这种相变称为有序–无序转变。以 A_1B 表示合金，只考虑最近邻相互作用。可以写出

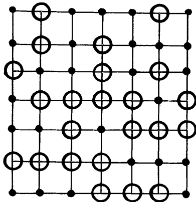
$$N_A+N_B=N,\ 2N_{AA}+N_{AB}=mN_A,\ 2N_{BB}+N_{AB}=mN_B=m(N-N_A)\quad (m\text{：格点配位数})\tag{1}$$

$$E_{0-d}=\varepsilon_{AA}N_{AA}+\varepsilon_{BB}N_{BB}+\varepsilon_{AB}N_{AB}\tag{2}$$

$$Z_{0-d}=e^{-\beta F_{0-d}}=\sum_{\substack{\text{粒子所有可能}\\ \text{占位的组态}}}e^{-\beta E_{0-d}}\quad (F_{0-d}\text{：自由能})\tag{3}$$

式中 N_A，N_B和 N 分别是 A 原子，B 原子和格点的总数，N_{AA}、N_{BB}和 N_{AB}分别为 AA、BB 和 AB 的总近邻对数，ε_{AA}、ε_{BB}和 ε_{AB}是相互作用能，E_{0-d}是位形能量，Z_{0-d}为配分函数。

点阵气体 lattice gas　又称格气，是一种非真实气体的模型。N_a（原子总数）个原子排列在周期点阵的 N 个格点上，每个格点最多只能为一个粒子占据；当两个最近邻格点都各为粒子占据时就称为一个最近邻对，以 N_{aa}表示最近邻对总数。如图所示，○代表格点空位，•表示格点有原子占据。设最近邻格点间的



距离为 a，系统的总能量和配分函数分别为

$$E_g=\sum_{N\geqslant j>i\geqslant 1}u_{ij}=-\varepsilon_0N_{aa}$$

$$u_{ij}=\begin{cases}\infty & \text{当 } r_{ij}=0\\ -\varepsilon_0 & \text{当 } r_{ij}=a\\ 0 & \text{当 } r_{ij}=\text{其他距离}\end{cases}\tag{1}$$

$$Z_{N_a}=\sum_{N_{aa}}\omega(N_a,N_{aa})e^{\beta\varepsilon_0N_{aa}}\tag{2}$$

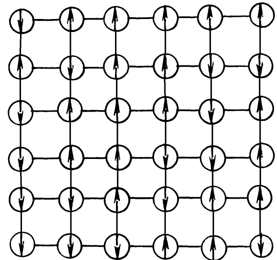
式中 u_{ij}是 i，j 格点的两个原子相互作用能，$\omega(N_a,N_{aa})$表示在给定 N_a 和 N_{aa}值之下，N_a 个原子在 N 个格点上所有可能的分布方式数。若每个格点占有一单位体积，则格气的总体积就是 N。巨配分函数可写做

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\mathscr{Z}(T,N,\mu)=\sum_{N_a=0}^{\infty}e^{\beta\mu N_a}Z_{N_a}(T,N)$$

$$(N_a\text{ 最大值只能为 }N_0)\tag{3}$$

它用于惰性气体时结果与实验相符，临界态时，密度大，空间分布接近点阵气体。

伊辛模型 Ising model　伊辛于 1925 年提出的研究铁磁体的一种最简单的模型。这种模型可近似地描述单轴各向异性铁磁物质，只需稍加改变，还可用来研究反铁磁物质以及合金的有序–无序相变、气液相变等。设由 N 个格点排列成的 d 维周期性点阵，每个格点上都有一个带自旋的粒子，每个自旋只能取向上或向下两个态，且只考虑最近邻自旋相互作用，这样的系统称为伊辛模型。二维伊辛模型如图所示。系统的哈密顿量可表示为



（⊕：自旋向上，⊕：自旋向下）

$$\mathscr{H}_I=-\sum_{(ij)}\varepsilon_{ij}s_is_j-\mu B\sum_i s_i=-J\sum_{(ij)}s_is_j-\mu B\sum_i s_i$$

式中自旋 $s_i=+1$（向上）或 -1（向下），μ 是自旋磁矩，ε_{ij}是最近邻自旋对（ij）的相互作用能或称交换积分，它仅与自旋间的距离有关，对于铁磁性物质 $\varepsilon_{ij}>0$，反铁磁性物质 $\varepsilon_{ij}<0$。这里为简单起见，已设相互作用是各向同性的，

故 ε_{ij}等于一给定的常数 J。右端第 1 项 $\sum_{(ij)}$ 是对近邻自旋对求和,第 2 项是在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的塞曼能量。让 $N_{\uparrow}$、$N_{\downarrow}$ 分别表示自旋向上和自旋向下的总粒子数,$N_{\uparrow\uparrow}$、$N_{\downarrow\downarrow}$ 和 $N_{\uparrow\downarrow}$ 分别表示自旋都向上、自旋都向下和自旋一个向上、一个向下的近邻对总数,$\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$、$\varepsilon_{\downarrow\downarrow}$ 和 $\varepsilon_{\uparrow\downarrow}$ 分别是相应的近邻对相互作用能量。于是,系统总能量和配分函数可以写成

$$E_I = -(N_{\uparrow\uparrow} + N_{\downarrow\downarrow})\varepsilon_{\uparrow\uparrow} - N_{\uparrow\downarrow}\varepsilon_{\uparrow\downarrow} + \mu B(N_{\downarrow} - N_{\uparrow}) \tag{1}$$

$$Z_I = \sum_{S_1=\pm1}\sum_{S_2=\pm1}\cdots\sum_{S_N=\pm1} e^{-\beta\mathscr{H}_I} = \sum_{\text{自旋所有可能组态}} e^{-E_I/k_BT} \tag{2}$$

伊辛模型与其他模型的等价性 equivalence of Ising model to other models 伊辛模型、点阵气体、有序-无序转变系统三者乍一看似乎完全不同,但实际上,它们有着密切的关系,具有等价性,它们的能量和配分函数有着相似的形式。三者的变量对应关系如表 1 所示。

关于点阵气体和伊辛模型、点阵气体和有序-无序转变系统各物理量的对应关系分别列表如表 2、表 3。表中 $\rho=\dfrac{N_{\uparrow}}{N}$ 为密度,M 是磁化强度,p 是压力,Z 为正则配分函数,$\mathscr{Z}$ 为巨正则配分函数,F 为自由能,m 是格点配位数。可以看出,计算三者的配分函数或各热力学量可用统一的方法处理,若解出三者之一,那么另外两个也可求得。

表 1

有序-无序转变	伊辛模型	点阵气体(格气)
A	$\uparrow$	格点有粒子占位(a)
B	$\downarrow$	格点空位
N_{A}	$N_{\uparrow}$	N_a
N_{B}	$N_{\downarrow}$	$N-N_a$
N_{AA}	$N_{\uparrow\uparrow}$	N_{aa}
$E_{0-\mathrm{d}}=(N_{\mathrm{AA}}\varepsilon_{\mathrm{AA}}+N_{\mathrm{AB}}\varepsilon_{\mathrm{AB}}+N_{\mathrm{BB}}\varepsilon_{\mathrm{BB}})$	$E_{\mathrm{I}}=-(N_{\uparrow\uparrow}+N_{\downarrow\downarrow})\varepsilon_{\uparrow\uparrow}-N_{\uparrow\downarrow}\varepsilon_{\uparrow\downarrow}+\mu B(N_{\downarrow}-N_{\uparrow})$	$E_g=\sum_{N\geqslant j>i\geqslant 1}u_{ij}=-N_{aa}\varepsilon_0$

表 2

点阵气体	伊辛模型
$-\varepsilon_0$	$-2(\varepsilon_{\uparrow\uparrow}-\varepsilon_{\uparrow\downarrow})$
$z\equiv e^{\beta\mu}=e^{\mu/k_BT}$	$\exp[-\beta(m\varepsilon_{\uparrow\uparrow}-m\varepsilon_{\uparrow\downarrow}-2\mu B)]$
$\sum_{N_a\text{个原子在格点上所有可能的分布}}\dfrac{z^{N_a}}{N_a!}e^{-\beta E_g}$	$\sum_{N_{\uparrow}\text{固定下,格点上所有可能的自旋组态}}e^{-\beta E_I}\exp\left[\beta N\left(-\dfrac{1}{2}m\varepsilon_{\uparrow\uparrow}+\mu B\right)\right]$
$\mathscr{Z}_g=\sum_{N_a=0}^{\infty}\dfrac{z^{N_a}}{N_a!}Z_N(N_a)$	$Z_I\exp\left[\beta N\left(-\dfrac{1}{2}m\varepsilon_{\uparrow\uparrow}+\mu B\right)\right]$
p	$\dfrac{-F_I}{N}+\mu B-\dfrac{1}{2}m\varepsilon_{\uparrow\uparrow}$
$2\rho-1$	$M\equiv\dfrac{\langle N_{\uparrow}-N_{\downarrow}\rangle}{N}=\dfrac{\langle 2N_{\uparrow}-N\rangle}{N}$
ρ	$\dfrac{M+1}{2}$

表 3

点阵气体	有序–无序转变
N_a	N_A
$-\varepsilon_0$	$-(\varepsilon_{AA}+\varepsilon_{BB}-2\varepsilon_{AB})$
$\frac{1}{N_a!}Z_V(N_a)$	$Z_{0-d}\exp\left[\beta m N_A(-\varepsilon_{AB}+\varepsilon_{BB})+\frac{1}{2}\beta m N\varepsilon_{BB}\right]$
$-F_g$	$-F_{0-d}+mN_A(-\varepsilon_{AB}+\varepsilon_{BB})-\frac{1}{2}mN\varepsilon_{BB}$

布拉格–威廉斯近似 Bragg-Williams approximation 一种关于伊辛模型的最简单的近似解法，于 1934～1935 年提出。现简要介绍这种方法及其应用。

(1)长程序(LRO)参量和短程序(SRO)参量。定义 LRO 参量 L：

$$\frac{N_\uparrow}{N}\equiv\frac{1}{2}(L+1)\quad(-1\leqslant L\leqslant+1)\quad(1)$$

当 $N_\uparrow=N$ 时，$L=+1$；当 $N_\uparrow=0$ 时，$L=-1$。这两种情况都属于完全长程序，全部自旋的磁矩同磁场平行或反平行，磁极化达到了饱和。于是

$$M=(N_\uparrow-N_\downarrow)\mu=N\mu L\quad(2)$$

可见，LRO 参量 L 的平均值与系统的磁化有着直接的联系。若 $N_\uparrow=N_\downarrow=\frac{N}{2}$，则有 $L=0$，$M=0$，称为完全长程无序。系统的哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned}H&=-J(4N_{\uparrow\uparrow}-2mN_\uparrow+mN/2)\\&\quad-\mu H(2N_\uparrow-N)\\&=-\frac{N}{2}mJ(2S-2L+1)-\mu BNL\end{aligned}\quad(3)$$

其中 $J(>0)$是近邻自旋对相互作用能，还引入了 SRO 参量 S，其定义为

$$\frac{N_{\uparrow\uparrow}}{mN/2}\equiv\frac{1}{2}(S+1)(-1\leqslant S\leqslant1)\quad(4)$$

当 $N_\uparrow=N$ 时，$S=+1$，当 $N_\uparrow=0$ 时，$S=-1$。式(4)左端$\frac{N_{\uparrow\uparrow}}{mN/2}$代表近邻对(↑↑)占总近邻对的比例或出现的概率。

(2)布拉格–威廉斯近似。他们认为，周期性点阵某一格点上自旋取某一方向的概率与邻近格点上自旋的取向无关，而只是系统中取该方向的自旋数占总格点数的百分比。于是，形成一个近邻对(↑↑)的概率应为$\left(\frac{N_\uparrow}{N}\right)^2$，这种观点是：每一格点上有一平均磁场，格点上自旋的取向只与这个格点所处的平均磁场有关，于是有

$$\frac{N_{\uparrow\uparrow}}{\frac{1}{2}mN}=\left(\frac{N_\uparrow}{N}\right)^2\quad(m\text{：格点配位数})\quad(5)$$

这种平均场近似法相当于忽略了自旋间的短程关联。它虽比较粗糙，过于简单，但却能给出一个关于 $E_I(N_\uparrow)$的非线性表示式。容易得到

$$H\approx-\frac{N}{2}mJL^2-\mu BNL\equiv H(L)\quad(6)$$

$$-\frac{\partial H}{\partial M}=B+\frac{mJ}{N\mu^2}M\equiv B_e\quad(7)$$

可见，除外磁场外，还有一与 M 呈线性关系的内部磁场 $B_i=\frac{mJ}{N\mu^2}M$，即所谓平均场，系统内受到一有效磁场 B_e 的作用。

(3)对 Ising 模型的应用。从正则配分函数

$$Z_I=\sum_L g(L)\mathrm{e}^{-H(L)/k_BT},$$

$$g(L)=\frac{N!}{N_\uparrow!(N-N_\uparrow)!}\quad(8)$$

出发，经简单运算即可得到

$$\bar{L}=\tanh\left(\frac{\mu B}{k_BT}+\frac{mJ}{k_BT}\right)\bar{L}\quad(9)$$

1)当 $\boldsymbol{B}=0$ 时，采用图解法，画出 $f(\bar{L})=\bar{L}$ 和 $f(\bar{L})=\tanh\left(\frac{mJ}{k_BT}\bar{L}\right)$，它们的交点即为解。得

到

$$\bar{L}=0 \qquad (mJ/k_BT<1),$$

$$\bar{L}=\begin{cases}\pm L_0 \\ 0\end{cases} \qquad (mJ/k_BT>1) \qquad (10)$$

$\bar{L}=\pm L_0\neq 0$ 表示有自发磁化,“±”代表磁化方向可向上或向下,但只能取其一。式(10)第2式中 $\bar{L}=0$ 的解并不对应自由能极小,应舍去。临界温度为 $T_c=\dfrac{mJ}{k_B}$,于是有 $\bar{L}$ 的表示式和 L_0 的渐近式

$$\bar{L}=\begin{cases}0, & T>T_c \\ \pm L_0, & T<T_c\end{cases} \qquad (11)$$

$$L_0\approx 1-2e^{-2T_c/T}\ (T\to 0),$$

$$L_0\approx\left[3\left(1-\frac{T}{T_c}\right)\right]^{1/2}\left(0<1-\frac{T}{T_c}\leqslant 1\right) \qquad (12)$$

对于 $0<T<T_c$ 范围内的任意温度 T,$L_0(T,0)$ 可用数值计算求出。可以得到在 B-W 近似下自发磁化 $M(T,0)$、内能 $U(T,0)$ 和比热容 $C_B(T,0)$:

$$\frac{1}{N\mu}M(T,0)=\begin{cases}0, & T>T_c \\ L_0, & T<T_c\end{cases} \qquad (13)$$

$$\frac{1}{N}U(T,0)=\begin{cases}0, & T>T_c \\ -\dfrac{m}{2}JL_0^2, & T<T_c\end{cases} \qquad (14)$$

$$\frac{1}{N}C_B(T,0)=\begin{cases}0, & T>T_c \\ -\dfrac{mJ}{2}\dfrac{\mathrm{d}L_0^2}{\mathrm{d}T} & T<T_c\end{cases}$$

$$C_B(T_c-0,0)=\frac{3}{2}Nk_B \qquad (15)$$

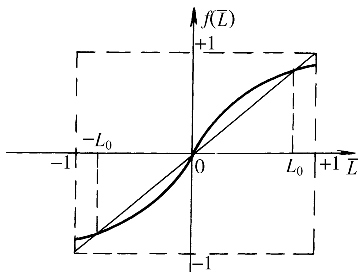


图 1　$\bar{L}=\tanh\left(\dfrac{mJ}{k_BT}\bar{L}\right)$ 式图解

$L_0(T,0)$-T、$\dfrac{C_B(T,0)}{Nk_B}$-T 分别示于图 2 和图 3。

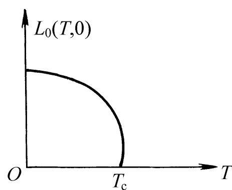


图 2

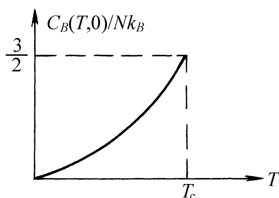


图 3

由于 B-W 近似忽略了短程关联,导致当 $T>T_c$ 时,$C_B=0$。可见,在 T_c 附近比热容 C_B 是不连续的。

2)当 $\boldsymbol{B}\neq 0$ 但在弱场下,$T>T_c$ 时 $\bar{L}\ll 1$,由式(9),$\tanh^{-1}\bar{L}=\bar{L}$,即有

$$\bar{L}\approx\frac{\mu}{k_B}\frac{1}{T-T_c}B \qquad (16)$$

$$\chi=\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_T=\frac{N\mu^2}{k_B}\frac{1}{(T-T_c)} \approx (T-T_c)^{-1} \qquad (17)$$

式(17)给出磁化系数 χ 与 $(T-T_c)$ 成反比的关系,称为居里(Curie)-外斯(Weiss)定律。若 $B\approx 0$,$\bar{L}\ll 1$,利用式(9)当 $T=T_c$ 时得

$$\bar{L}\propto B^{1/3} \text{或} \quad M(T=T_c,B)\propto B^{1/3} \qquad (18)$$

式(12)的第 2 式、式(17)和(18)给出了在 B-W 近似下,相应的临界指数。综上所述,在 T_c 以下,铁磁性物质确有相变,这是很有意义的结论。但此结论与系统的点阵结构无关,即不论是一维还是二维、三维的格子都可以,然而,可以严格证明,一维 Ising 模型不可能有相变,二维三维则是有的。B-W 近似所得的结果与外斯的平均场近似相同,由于忽略了自旋间的

短程相关和涨落，系统的性质完全决定于长程序参量 L。

长程序(LRO)参量 long range order parameter 见“布拉格–威廉斯近似”。

短程序(SRO)参量 short range order parameter 见“布拉格–威廉斯近似”。

平均场近似 average field approximation 见“布拉格–威廉斯近似”。

居里–外斯定律 Curie-Weiss law 见“布拉格–威廉斯近似”。

贝特近似 Bethe approximation 1935 年提出的一种关于伊辛模型的近似解法，对布拉格–威廉斯近似做了修正和改进。设想在伊辛模型中，有一个由中心自旋 s_0 及其 m 个最近邻自旋组成的集团(图 1)。此集团的哈密顿量和配分函数为

$$H_{m+1}=-J\sum_{j=1}^{m}s_0 s_j-\mu B s_0-\mu(B+B')\sum_{j=1}^{m}s_j \tag{1}$$

$$Z=\sum_{s_0=\pm1}\sum_{s_j=\pm1}\exp\left[\alpha s_0+(\alpha+\alpha')\sum_{j=1}^{m}s_j+\gamma\sum_{j=1}^{m}s_0 s_j\right] \tag{2}$$

式中 B 是外磁场磁感应强度，B' 是引入的一个平均分子场，它描述 s_0 的近邻 1，2，…，m 与点阵中其他自旋的相互作用。$\alpha=\dfrac{\mu B}{k_B T}$，$\alpha'=\dfrac{\mu B'}{k_B T}$，$\gamma=\dfrac{J}{k_B T}$。从式(2)出发，利用自洽条件 $\langle s_0\rangle=\langle s_j\rangle$，可求得确定分子平均场 B' 的方程

$$e^{2\alpha'}=\left[\frac{\cosh(\alpha'+\alpha+\gamma)}{\cosh(\alpha'+\alpha-\gamma)}\right]^{m-1} \tag{3}$$

可以利用式(3)来讨论自发磁化的可能性，为此令 $\alpha=0(B=0)$，并让 $\zeta\equiv e^{2\alpha'}$，于是式(3)变为

$$\zeta=\left[\frac{1+\zeta e^{2\gamma}}{\zeta+e^{2\gamma}}\right]^{m-1} \tag{4}$$

若 $\alpha'=0$，则 $\zeta=1$，它恒为方程(4)的一个解，是属于没有自发磁化的解。容易看出，如果 ζ_1 是式(4)的解，则 ζ_1^{-1} 也是它的解。可用图解法对式(4)求解，图 2 中 $f_1(\zeta)=\zeta$，$f_2(\zeta)=\left[\dfrac{1+\zeta e^{2\gamma}}{\zeta+e^{2\gamma}}\right]^{m-1}$，$f_1(\zeta)$ 的斜率恒为 1，$f_2(\zeta)$ 在 $\zeta=1$ 处的斜率为 $l=\dfrac{(m-1)(e^{4\gamma}-1)}{(1+e^{2\gamma})^2}$。因此，如果 $l<1$，则 $\zeta=e^{2\alpha'}$ 是惟一的解，此时 $\alpha'=0$，

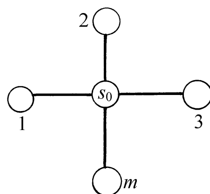


图 1

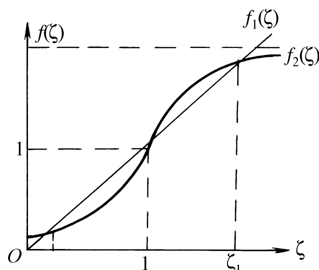


图 2

故无自发磁化。图 2 表明，当 $l>1$ 时，存在 $\zeta=1$，ζ_1 及 ζ_1^{-1} 三个解。根据定义，布拉格–威廉斯近似中的长程序参量 L 的平均值为 $\langle s_0\rangle$，可以证明

$$\bar{L}=\frac{\zeta^{m/(m-1)}-1}{\zeta^{m/(m+1)}+1} \tag{5}$$

由式(5)看出，若 $\zeta=\zeta_1=1$，则 $\bar{L}=0$；如果 $\zeta_1\neq1$，则 $\bar{L}\neq0$，存在自发磁化，$\zeta_1(\neq1)$ 及 ζ_1^{-1} 对应于自发磁化解，同时，若 $\zeta_1\neq1$ 与 $\bar{L}$ 对应，那么 ζ_1^{-1} 就与 $-\bar{L}$ 相对应，它们分别属于自旋相反(向上与向下)的两种情况。为讨论临界温度，在 $f_2(\zeta)$ 于 $\zeta=1$ 处的斜率的表示式中 $l=1$，并让 $T=T_c$，即有

$$k_B T_c=2J/\ln\left(\frac{m}{m-2}\right) \tag{6}$$

式中临界温度 T_c 即是贝特近似下 Ising 模型

的居里温度。并有 $\bar{L}=0,\zeta=e^{2\alpha'}=1$,当 $T>T_c$ 时;$\bar{L}>0,\zeta=e^{2\alpha'}>1$,当 $T<T_c$ 时。对于 $B=0(\alpha=0)$情形,当 $T>T_c$(此时 $\alpha'=0$)时,可以求得

$$\bar{N}_{\uparrow\uparrow}=\frac{mN}{2}\frac{1}{2(1+e^{-2J/k_BT})} \quad (7)$$

若 $J=0$,则有 $\frac{\bar{N}_{\uparrow\uparrow}}{mN/2}=\frac{1}{4}$
这是因为各种自旋取向的近邻对机会均等的缘故。如果 $J>0$,此时相邻自旋间的关联有利于平行自旋偶的形成,表明系统中短程序起着作用。而布拉格–威廉斯近似正是忽略了自旋间的短程关联。设 $B=0$,在 $T>T_c$ 情形下,无长程序($\bar{L}=0$),可以求得内能和比热容

$$U_0=-\frac{N}{2}mJ\frac{1-e^{-2\gamma}}{1+e^{-2\gamma}}=-\frac{1}{2}NmJ\tan h\gamma \quad (8)$$

$$C_0/Nk_B=\frac{1}{2}m\gamma^2\mathrm{sech}^2\gamma \quad (9)$$

需着重指出,当 $T>T_c$ 时,比热容不为零正是贝特近似考虑了短程关联的结果,它与布拉格–威廉斯近似中对于 $T>T_c$ 的一切温度值相应的比热容均等于零明显不同,前者更接近实验结果。

李–杨相变理论 Lee-Yang theory of phase transition 相变发生的机制是三十年代中叶开始争议的问题。1952 年李政道和杨振宁发表了从巨正则系综理论出发,论证关于相变发生的可能性和条件的两条定理即李–杨定理。

定理 1 对于所有 $y>0$, $\lim_{V\to\infty}[V^{-1}\ln\mathscr{Z}]\equiv p/k_BT$存在,这个极限与体积 V 的形状无关,而且是 y 的连续单调递增函数。假设当 $V\to\infty$时,V 的表面积的增加不比 $V^{2/3}$快。

定理 2 如果 R 为复平面中包含一段正实轴区域,而 R 中总不包含 $\mathscr{Z}(V,y)=0$ 的根,则在 R 中,$\lim_{V\to\infty}V^{-1}\ln\mathscr{Z}$, $\lim_{V\to\infty}V^{-1}\frac{\partial}{\partial\ln y}\ln\mathscr{Z}$, $\cdots$, $\lim_{V\to\infty}V^{-1}\frac{\partial^n}{(\partial\ln y)^n}\ln\mathscr{Z}$俱存在,且都是 y 的解析函数,此外,在 R 中$\frac{\partial}{\partial\ln y}$与 $\lim_{V\to\infty}$ 可以对易,即有

$$\lim_{V\to\infty}\left[V^{-1}\frac{\partial^n}{\partial\ln y^n}\ln\mathscr{Z}\right]=\frac{\partial^n}{\partial\ln y^n}\left[\lim_{V\to\infty}V^{-1}\ln\mathscr{Z}\right]。$$

其中 $y\equiv e^{\mu/k_BT}\lambda_T^{-3}\left(\lambda_T\equiv\left(\frac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}\right.$是热波长$\Big)$,巨配分函数 $\mathscr{Z}(T,V,y)=\sum_{N=0}^{N_m}\frac{y^N}{N!}Q_N(T,V)$,$N_m$ 是任何给定的、有限大小的体积 V 中所能容纳的粒子数的最大值,Q_N 为位形积分。上述定理表明方程 $\frac{p}{k_BT}=\lim_{V\to\infty}(V^{-1}\ln\mathscr{Z})$, $\frac{1}{v}=\lim_{V\to\infty}\left(V^{-1}y\frac{\partial}{\partial y}\ln\mathscr{Z}\right)$($v$:比容)可能呈现相变,当 $V\to\infty$时,实轴上存在 $\mathscr{Z}(y)=0$ 的根的极限点,相变正是发生在这些点的地方。杨、李将此定理用于二维 Ising 模型。

伊辛模型的昂萨格解 Onsager solution of Ising model 伊辛 1925 年对一维情形严格求解,发现不存在相变,就误认为更高维的 Ising 模型也不会发生相变。之后,佩尔斯论证了二维或三维 Ising 模型会出现铁磁相变。柯克伍德又发展了高温级数展开方法,有力地支持了佩尔斯的结论。1944 年,昂萨格对二维 Ising 模型采用解析法(即矩阵法)获得了严格解。对于正方形晶格的二维 Ising 模型,零磁场情形,昂萨格导出了下列方程

$$\frac{\ln Z_{L\times n}}{nL}=\frac{1}{2}\ln(2\sinh 2\beta J)+\frac{1}{2n}\sum_{r取奇数}\theta_r \quad (1)$$

式(1)称为昂萨格方程。令 $\omega=\frac{r\pi}{n}$,由于 $\Delta r=2$,故有 $\Delta\omega=\frac{\pi}{2n}\Delta r=\frac{\pi}{n}$,当 $n\to\infty$时,式(1)右端求和变为积分,并注意到 $L\times n=N$(N:总格点数),可得到一个自旋的自由能和内能分别为

$$f_I(T,0)=-\frac{1}{\beta}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\ln Z=-\frac{1}{\beta}\left[\frac{1}{2}\ln(2\sinh 2\beta J)+\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi\theta(\omega)\mathrm{d}\omega\right] \quad (2)$$

$$u_I(T,0)=-J\coth 2\beta J\left[1+\frac{2}{\pi}m'\cdot\int_0^{\pi/2}\frac{\mathrm{d}\phi}{\sqrt{1-m^2\sin^2\phi}}\right] \quad (3)$$

其中

$$\cosh\theta(\omega)=\cosh2\phi\cosh2\phi' -\cos\omega\sinh2\phi\sinh2\phi' \tag{4}$$

$\phi=\beta J, \phi'=\tanh^{-1}e^{-2\beta J}$ （J:近邻自旋对相互作用能） (5)

$$m=\frac{2\sinh2\beta J}{\cosh^2 2\beta J},\ m'=2\tanh^2 2\beta J-1 \tag{6}$$

式(3)右端积分在 $m=1$ 时有一奇点，它对应于相变，于是有

$$T_c=\frac{1}{k_B}2.269J \tag{7}$$

当温度 T 趋近于临界温度 T_c 时，每个自旋的自由能 f_I 和熵 S_I 分别为

$$f_I\to f_c=-k_BT_c(0.9296) \tag{8}$$

$$s_I\to s_c=k_B\ln(1.358) \tag{9}$$

在 $T=T_c$ 附近，每个自旋的比热容可写成

$$c_I(T,0)\approx\frac{2k_B}{\pi}\left(\frac{2J}{k_BT_c}\right)^2\left[-\ln\left|1-\frac{T}{T_c}\right| +\ln\left(\frac{k_BT_c}{2J}\right)-\left(1+\frac{\pi}{4}\right)\right] \tag{10}$$

从式(10)看出，当 $|T-T_c|\to0$ 时，比热容按对数趋于∞，即在 T_c 附近 c_I 是发散的，如图 1 所示。

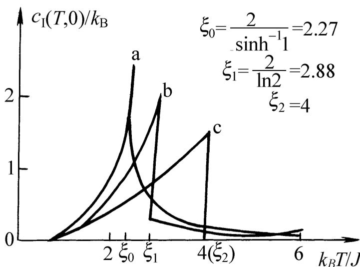


图 1 二维 Ising 模型的比热容

a. Onsager; b. Bethe-Peierls; c. Bragg-Williams

示。自发磁化的计算非常复杂，昂萨格只给出其结果。杨振宁于 1952 年对二维 Ising 模型作了计算，证明每个自旋的自发磁化为

$$m_I(T,0)=\begin{cases}0 & (T>T_c)\\ \dfrac{(1+z^2)^{1/4}(1-6z^2+z^4)^{1/8}}{(1-z^2)^{1/2}} & (T<T_c)\end{cases} \tag{11}$$

其中已将自旋的磁矩取作 1，而 z 为

$$z=e^{-2J/k_BT} \tag{12}$$

转变温度 T_c 对应的 z 值为 $z_c=\sqrt{2}-1$。在 $T\to0$ 和 $T\to T_c-0$ 时，m_I 的渐近行为：

$$m_I(T,0)\approx\begin{cases}1-2\exp(-8J/k_BT) & (T\to0)\\ 1.2224\left(1-\dfrac{T}{T_c}\right)^{1/8} & (T\to T_c-0)\end{cases} \tag{13}$$

$m_I(T,0)$- T 示于图 2 上，在 $T\to T_c-0$ 端，严格解的曲线比近似解的更陡。

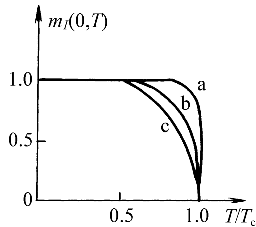


图 2 二维 Ising 模型的自发磁化

a. Onsager; b. Bethe-Peierls; c. Bragg Williams

临界指数 critical exponent 为研究各种系统如何趋近临界点这个很有意义的课题，需要引入临界指数的概念。趋近临界点时，热力学函数有的趋于零，有的发散，有的则保持有限。为方便起见，引入约化变量形式的参量

$$\varepsilon=\frac{T-T_c}{T_c} \tag{1}$$

来描述同临界点的距离，式中 T_c 是临界温度。某些热力学函数在临界点邻域可以表示为幂函数的形式

$$f(\varepsilon)=B\varepsilon^{\lambda}(1+A\varepsilon^{l}+\cdots)\quad(l>0) \tag{2}$$

函数 $f(\varepsilon)$ 的临界指数定义如下：

$$\lambda=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln\varepsilon} \tag{3}$$

若 $\lambda>0$,则 $f(\varepsilon)$在临界点趋于零,若 $\lambda<0$,则 $f(\varepsilon)$在临界点发散,除温度外,也可选用其他物理量如压强、磁场、密度等来描述趋于临界点时的指数。由一个系统如何趋近临界点,而可定义一系列的临界指数,这些临界指数一般是非整数,以磁性系统为例加以阐述。

(1)序参数 M_0 随温度 T 的变化,临界指数 β

$$M_0=M(\varepsilon,B=0)\propto(T_c-T)^{\beta}\propto(-\varepsilon)^{\beta},\tag{4}$$

当 $T\to T_c^-$ 时

实验表明,β为正的非整数,不同材料的 β值相差不大,其范围大体是 0.3～0.5。

(2)磁化强度 M 随磁场 B 的变化,临界指数 δ

$$M\propto B^{1/\delta},\text{当 } T=T_c,B\to 0^+\text{时}\tag{5}$$

δ的范围是 4～6。

(3)零场强下的磁化系数 χ 随温度的变化,临界指数 γ

$$\chi\equiv\left(\frac{\partial M}{\partial B}\right)_{B=0^+}\propto\begin{cases}|T-T_c|^{-\gamma}\propto|\varepsilon|^{-\gamma}, & T\to T_c^+\\ |T_c-T|^{-\gamma'}\propto|-\varepsilon|^{-\gamma'}, & T\to T_c^-\end{cases}\tag{6}$$

理论和实验结果都表明 $\gamma=\gamma'$,但两式中的比例系数不同。

(4)定场强下比热容 C_B 随温度的变化,临界指数 α

$$C_B\equiv T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_B\propto\begin{cases}|T-T_c|^{-\alpha}\propto|\varepsilon|^{-\alpha}, & T\to T_c^+\\ |T_c-T|^{-\alpha'}\propto|-\varepsilon|^{-\alpha'}, & T\to T_c^-\end{cases}\tag{7}$$

实验和理论均得到 $\alpha=\alpha'$,但两式的比例系数不同,当 $B=0$, $T\to T_c$ 时,实验上观测到 $C_B\to\infty$。

(5)自旋密度的涨落相关函数 $\Phi_{ss}(r)$随距离 r 的变化,临界指数 η 　$\Phi_{ss}(r)$通过实验上测得中子散射截面加以确定

$$\Phi_{ss}(r)\propto r^{-d+2-\eta},\text{当 } T\to T_c\text{ 时}\tag{8}$$

其中 d 是空间维数,若以 $\varphi_{ss}(k)$表示 $\Phi_{ss}(r)$的傅氏分量,则有

$$\varphi_{ss}(k)\propto k^{-2+\eta},\text{当 } T\to T_c,\text{波矢 } k\approx 0\tag{9}$$

(6)相关长度 ξ随温度的变化,临界指数 ν

$$\xi\propto\begin{cases}|T-T_c|^{-\nu}\propto|\varepsilon|^{-\nu}, & T\to T_c^+\\ |T_c-T|^{-\nu'}\propto|-\varepsilon|^{-\nu'}, & T\to T_c^-\end{cases}\tag{10}$$

实验和理论都给出 $\nu=\nu'$,但两式的比例系数不同。

对其他二级相变的例子,也可用这些临界指数来表征它们的临界行为。譬如气-液相变,只需作如下替换:$M\to\rho_1-\rho_g$(液相与气相的密度差),$B\to p-p_c$(与临界压强之差),$\chi\to\kappa_T$(等温压缩系数),$C_B\to C_p$(定压比热容),$\varphi_{ss}(k)\to\varphi(k)$(密度涨落相关函数的傅氏分量),且各临界指数的定义均同于以上各式。不同材料的临界指数虽有不同,但相差不大,大体上有 $\alpha\approx0.1$,$2\beta\approx0.6$～0.7,$\gamma\approx1.2$～1.4,η很小,δ较大,ν可由实验数据推算得到,其值稍大于$\frac{1}{2}$。

广义齐次函数 generalized homogeneous function 标度理论认为,在临界点邻域,某些热力学函数是广义齐次函数,因此,为阐明和应用标度理论,必须了解广义齐次函数的概念和性质。若一个两变量的函数 $f(x,y)$满足

$$f(\lambda^a x,\lambda^b y)=\lambda f(x,y),\text{对所有 }\lambda\tag{1}$$

则称 $f(x,y)$为广义齐次函数(GHF)。它具有以下性质:

定理 1　若 $f(x,y)$是一个 GHF,则 $f(x,y)$的任何偏导数也是一个 GHF,也就是说若 $f(\lambda^a x,\lambda^b y)=\lambda f(x,y)$(对所有 λ),则 $f_{jk}(x,y)=\frac{\partial^j}{\partial x^j}\frac{\partial^k}{\partial y^k}f(x,y)$满足方程

$$f_{jk}(\lambda'^{a'}x,\lambda'^{b'}y)=\lambda' f_{jk}(x,y)\quad\text{对所有 }\lambda'\tag{2}$$

定理 2　若 $f(x,y)$是 GHF,则其勒让德变换也是 GHF。让 $u=\frac{\partial f}{\partial x}=f_1(x,y)$,则勒让德变换 $g(u,y)=f(x,y)-xu$也是 GHF,即有

$$g(\lambda^{1-a}u,\lambda^b y)=\lambda g(u,y)\tag{3}$$

应注意 $\lambda^a x$ 在 $f(x,y)$中的作用相当于 $\lambda^{1-a}u$ 在 $g(u,y)$中的作用,因此在作了变换之后记住将 $\lambda^a\to\lambda^{1-a}$。

标度理论 scaling theory 是在总结、分析和归纳实验结果的基础上,提出的一种研究临界现象的唯象理论。它不能确定临界指数的值,但可以建立临界指数之间的关系——标度律。

(1)标度假设　它是标度理论的基础,其基本思想是在临界点邻域,表征涨落相关的空间距离——相关长度 ξ变得很大,当趋于临界点时,$\xi\to$

∞,结果,关于有限的点阵距离的一切效应都消失了,ξ是惟一的特征长度。ξ的奇异性决定了所有热力学函数的奇异性。在临界点邻域,任何尺度变换例如改变到临界点的距离时,将不改变吉布斯函数的函数形式,只改变其标度。

(2)维顿标度理论　维顿(Widom)于1965年提出。二类相变的具体形式可以多种多样,但在临界点热力学函数具有某种奇异性则是普遍的。在临界点邻域,某些热力学函数可表示成幂函数的形式,这些幂数即为临界指数,一般是非整数。并假定在临界点邻域,吉布斯函数 G 是一个广义齐次函数(GHF),可将 G 的奇异部分作标度,利用GHF的性质来寻求临界指数间的关系。以磁性系统为例,可将 G 写做

$$G(\varepsilon, B)=G_r(\varepsilon, B)+G_s(\varepsilon, B),$$

$$\varepsilon=\frac{T-T_c}{T_c} \quad (1)$$

角标"r"表示正常部分,"s"代表奇异部分,在系统趋于临界点时,$G_r(\varepsilon, B)$保持不变,而 $G_s(\varepsilon, B)$是我们感兴趣的,因为它包含了许多重要奇异行为,可以写出

$G_s(\lambda^a\varepsilon, \lambda^b B)=\lambda G_s(\varepsilon, B)$　(λ:任意参数,a,b:待定参数)　(2)

标度幂 a,b 不能由标度理论确定。按各临界指数的定义,利用式(2)及其性质即可求得各个临界指数与参数 a,b 的关系,获得一些标度律,其中维顿标度律的表示式为

$$\gamma=\beta(\delta-1) \quad (3)$$

式中 β、δ 和 γ 分别是与自发磁化强度随温度变化、磁化强度随磁场的变化和磁化系数随温度变化有关的临界指数。流体系统和磁性系统在临界点附近的标度性质已为实验证实。

标度假设　scaling hypothesis　见"标度理论"。

维顿标度理论　Widom scaling theory　见"标度理论"。

标度律　scaling law　联系各临界指数的关系式。标度理论认为,在临界点邻域,吉布斯函数 G 是一个广义齐次函数(GHF),对于磁性系统,可以写出

$$G(\lambda^a\varepsilon, \lambda^b B)=\lambda G(\varepsilon, B),$$

对于所有 λ　$\left(\varepsilon\equiv\frac{T-T_c}{T_c}\right)$　(1)

并利用临界指数的定义和GHF的性质,可求得各临界指数与参数 a,b 的关系

$$\beta=\frac{1-b}{a}, \delta=\frac{b}{1-b}, \gamma=\gamma'=\frac{2b-1}{a},$$

$$\alpha=\alpha'=2-\frac{1}{a} \quad (2)$$

其中 β 和 δ 是分别描述磁化强度在 $B=0$,$T\to T_c^-$ 和 $T=T_c$,$B\to 0^+$ 时行为的临界指数,$\gamma(\gamma')$和 $\alpha(\alpha')$则是分别描述 $B=0$,$T\to T_c^+$($T\to T_c^-$)时磁化系数行为和 $T\to T_c^+$($T\to T_c^-$)时定场强比热容行为的临界指数。由式(2)即可得到

(1)卢斯布鲁克(Rushbrooke)标度律

$\alpha'+2\beta+\gamma'=2$　(即卢斯布鲁克不等式中取等号)　(3)

(2)维顿(Widom)标度律

$$\gamma=\beta(\delta-1) \quad (4)$$

(3)格里菲斯(Griffithe)标度律

$\alpha'+\beta(\delta+1)=2$　(即格里菲斯不等式中取等号)　(5)

(4)格里菲斯方程　注意到自由能 $F(\varepsilon, M)$ 是 $G(\varepsilon, B)$的勒让德变换,且变换后,G 中的 $\lambda^b B$ 必须换成 F 中的 $\lambda^{1-b}M$,故有

$$F(\lambda^a\varepsilon, \lambda^{1-b}M)=\lambda F(\varepsilon, M) \quad (6)$$

将式(6)两端对磁化强度 M 求导,注意到 $B=-\frac{\partial F}{\partial M}$,并令 $B\left(\frac{\varepsilon}{M^{1/\beta}}\right)\equiv B\left(\frac{\varepsilon}{M^{1/\beta}}, 1\right)$,即可得出下述格里菲斯方程

$$B(\varepsilon, M)=M^{\delta}B(\varepsilon/M^{1/\beta}) \quad (7)$$

式(7)是格里菲斯最先所作的齐次性假定,他设在 T_c 附近物态方程是式(7),由此导出标度关系。

(5)斐修(Fisher)标度律　联系描述在临界点邻域,相关函数和相关长度行为的临界指数 η 和 ν 与其他临界指数的关系。按照在临界点邻域,一切物理量的奇异性来源于 $\xi\to\infty$,ξ是惟一有关的特征长度的基本思想,假设自旋密度相关函数取如下形式:

$\varphi(k)\approx\xi^{y}f(k\xi)$　(y:待定常数)　(8)

利用磁化系数公式 $\chi=\frac{\mu^2}{k_B T}\varphi(0)$($\mu$:自旋磁矩)、临界指数 γ、ν 和 η 的定义式及式(8),即

可得到斐修标度律

$$\gamma-2+\eta=0 \quad 或 \quad \gamma=\nu(2-\eta) \qquad (9)$$

(6)约瑟夫森(Josephson)标度律　联系临界指数 α、ν 与空间维数 d 的关系式。采用量纲分析方法导出。在临界点,系统的总吉布斯函数 G 在尺度变化下不变,故 G 的标度量纲为零即 $\dim G=0$,单位体积的吉布斯函数 g 的标度量纲 $\dim g=\dim \frac{G}{V}=\dim G-\dim V=0-(-d)=d$, d 是空间维数。而相关长度 ξ 的标度量纲为 $\dim\xi=-1$,故可假设在临界点邻域, g 具有如下形式

$$g\propto \xi^{-d} \qquad (10)$$

这实际上是 g 的奇异部分。利用公式 $C_B=-T\frac{\partial^2 g}{\partial T^2}$和临界指数 ν 和 α 的定义式,即可求得约瑟夫森标度律

$$\nu d=2-\alpha \qquad (11)$$

卢斯布鲁克标度律　Rushbrooke scaling law　见“标度律”。

维顿标度律　Widom scaling law　见“标度律”。

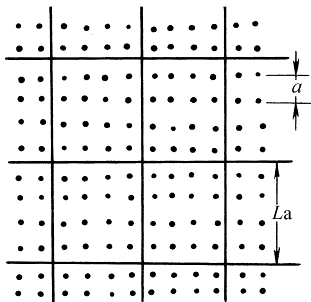
格里菲斯标度律　Griffithe scaling law　见“标度律”。

格里菲斯方程　Griffithe equation　见“标度律”。

斐修标度律　Fisher scaling law　见“标度律”。

约瑟夫森标度律　Josephson scaling law　见“标度律”。

卡达洛夫标度变换　Kadanoff scaling transformation　卡达洛夫1966年提出标度变换的概念,并用于Ising模型。考虑一含 N 个格点



的 d 维Ising系统,每个自旋的最近邻数(配位数)为 n,系统的哈密顿量为

$$H=-J\sum_{(ij)}^{nN/2}s_i s_j-\mu B\sum_{i=1}^{N}s_i \qquad (1)$$

现将格子分为边长为 La 的元胞, a 是晶格常数,如下图所示, $d=2$, $L=4$。每个元胞含 L^d 个自旋。若选择 L,使 $La\ll\xi$(ξ 是晶格自旋涨落的相关长度)。设想每个元胞具有一个净的自旋磁矩,它起着“单一”自旋的作用,具有向上或向下的取向。于是就将原来的格点自旋系统标定为新的元胞自旋系统。在临界点邻域,由于 $\xi\to\infty$,一切有限大小的微观特征长度的效应均不复存在,此时,系统应具有某种尺度变换下的不变性,因此,格点自旋系统与元胞自旋系统是等价的。元胞自旋取值范围是 $L^d\sim-L^d$,将元胞自旋变量记为 $\tilde{S}_l$,卡达洛夫假设

$$S_l'=\sum_{i\in l}s_i=R\tilde{S}_l, R\approx L^d, \tilde{S}_l=\pm 1 \qquad (2)$$

其中 S_l'是元胞 l 中的总自旋。元胞自旋系统的哈密顿量为

$$\tilde{H}=-\tilde{J}\sum_{(lm)}^{nNL^{-d}/2}\tilde{S}_l\tilde{S}_m-\mu\tilde{B}\sum_{l=1}^{NL^{-d}}\tilde{S}_l \qquad (3)$$

式中 $\tilde{J}$ 是最近邻元胞自旋对之间的有效相互作用。可见,两个系统的哈密顿量除所有量重新标定外(μ 除外)是相同的,在标定系统中,温度变量也相应地记作 $\tilde{\varepsilon}$。两个系统的总吉布斯函数应相等

$$G(\tilde{\varepsilon},\tilde{B})=G(\varepsilon,B) \qquad (4)$$

显然,每个元胞的吉布斯函数 $g(\tilde{\varepsilon},\tilde{B})$和每个格点的吉布斯函数 $g(\varepsilon,B)$关系为

$$g(\tilde{\varepsilon},\tilde{B})=L^d g(\varepsilon,B) \qquad (5)$$

为利用式(5),需将 $\tilde{B}$ 与 B, $\tilde{\varepsilon}$ 与 ε 联系起来,设

$$\tilde{\varepsilon}=\varepsilon L^x \quad (x 为正) \qquad (6)$$

注意到式(2),则有 $B\sum_{i=1}^{N}s_i=B\sum_{l=1}^{NL^{-d}}\sum_{i\in l}s_i=B\sum_{l=1}^{NL^{-d}}S_l'=BR\sum_{l=1}^{NL^{-d}}\tilde{S}_l$,故

$$\tilde{B}=BR=BL^y \qquad (7)$$

由于 $-L^d<R<L^d$,故 $y<d$,若定义 $\lambda=L^d$,则由式(5)、(6)和(7)得出

$$g(\lambda^{x/d}\varepsilon, \lambda^{y/d}B) = \lambda g(\varepsilon, B) \qquad (8)$$

式(8)表明，$g(\varepsilon, B)$是一个广义齐次函数，且有 $x=ad$，$y=bd$，由于 $y<d$，因而 $b<1$，与实验一致。卡达洛夫还直接分析了相关函数和相关长度在标度变换下的变换形式，导出斐修和约瑟夫森标度律，预言了相关函数之间的某些关系，试图论证维顿的标度理论，他的工作富有成效和启发性，但论证工作中也存在一些含糊不清的地方，只是在威尔逊的重正化群理论中才得到阐明。

量纲分析方法 method of dimensional analysis　一种用于标度理论的简明、有效的方法。在卡达洛夫标度变换中，晶格常数 a 变为新的“晶格常数” La，这相当于用增大到 L 倍的尺子来量度。若用 Δx 和 $\Delta x'$分别表示以 a 和 La 为长度单位所量度的空间同样的距离，则有 $\Delta x \to \Delta x' = L^{-1}\Delta x$，而波矢 $k \to k' = Lk$。定义标度量纲如下：某一物理量 A 在上述尺度变换下有 $A \to A' = L^{\lambda}A$，就称物理量 A 的标度量纲为 λ，记为 $\dim A = \lambda$。又如 $\dim\Delta x = -1$，$\dim k = +1$，$\dim V = -d$，相关长度的量纲 $\dim\xi = -1$。并有 $\dim AB = \dim A + \dim B$，$\dim A/B = \dim A - \dim B$，$\dim A^{\zeta} = \zeta\dim A$ 等。它与通常的量纲不是一回事。运用量纲分析方法可以简便地导出标度律。举例如下：在临界点邻域，ξ是惟一有关的特征长度，可设自旋密度相关函数取如下形式：$\varphi(k) \approx \xi^{y} f(k\xi)$（$y$：待定参数）故

$$\begin{aligned}\dim\varphi(k) &= \dim \xi^{y} f(k\xi)\\ &= \dim \xi^{y} + \dim f(k\xi) = -y \qquad (1)\end{aligned}$$

这是因为 $\dim k\xi = 0$，故 $\dim f(k\xi) = 0$。另一方面，按照临界指数 η 的定义：$\varphi(k) \propto k^{-2+\eta}$（当 $|T - T_c| \to 0$ 时），因此有

$$\begin{aligned}\dim\varphi(k) &= \dim k^{-2+\eta} = (-2+\eta)\dim k\\ &= -2+\eta \qquad (2)\end{aligned}$$

比较式(1)和(2)，即得斐修标度律

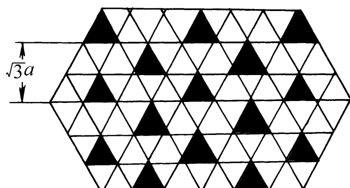
$$y - 2 + \eta = 0 \qquad (3)$$

临界行为的普适性 universality of critical behavior　是20世纪60年代后期在总结、分析实验结果的基础上提出的一种假设：空间维数 d 和序参量维数 n 这两个量决定体系的临界行为，具有相同的 d 与 n 的体系属于同一普适类，它们有相同的临界指数，亦即有相同的临界行为。普适性假设的依据是：物理上不同的体系，不同的晶体结构，不同的相互作用，或属于不同的二类相变，它们的临界指数却十分接近。这表明，对于临界行为，某些共性起主导作用，而代表特殊物质、特殊相变的一些差别似乎不起作用。现对序参量的维数略作说明。例如普通流体气液相变的序参量是两相密度差 $\rho_l - \rho_g$，它是一标量，对应 $n=1$。对于铁磁体相变，序参量是磁化强度 M，相应的量是微观量自旋，因此 n 就是自旋矢量的分量数。一般的合金有序-无序相变，如二元溶液 $n=1$。液^{4}He、超导相变，其序参量为复数，则属于 $n=2$ 的情况。

坐标空间重正化群 position space renormalization group　简记为 PSRG，亦称实空间重正化群（RSRG），是 20 世纪 70 年代初威尔逊（Wilson）在标度理论和普适性的基础上，推广量子场论中的重正化群方法并应用于相变和临界现象而建立的理论。它论证了标度假设，揭示了标度理论的物理实质，提供了以统计物理为基础微观计算临界指数的系统方法。他因此于 1982 年获诺贝尔奖。在临界点，相关长度 $\xi \to \infty$，系统应具有尺度变换下的不变性，故重正化群方法不是去直接计算配分函数 Z，而是找这种不变性，从而确定临界点，计算临界指数。现以二维三角形晶格的伊辛模型为例作简要介绍。经尺度变换和“粗粒化”即对元胞内部自由度平均后，由原来的格点自旋系统变为元胞（由 3 个格点组成）自旋系统，晶格常数由 a 放大到 $La = \sqrt{3}a$，后者仍保持与原来晶格相同的三角形对称形式（如下页图所示），且哈密顿量近似相等

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= \tilde{K}\sum_{(lm)}\tilde{S}_l\tilde{S}_m + \tilde{h}\sum_{l=1}^{\tilde{N}}\tilde{S}_l\\ &\approx K\sum_{(ij)}s_i s_j + h\sum_{i=1}^{N}s_i = H \qquad (1)\end{aligned}$$

其中 $K \equiv J/k_B T$，$J>0$ 是最近邻自旋有效相互作用，$h \equiv \dfrac{\mu B}{k_B T}$，$\tilde{S}_l$，$\tilde{S}_m$ 为元胞自旋变量。显然，两者的 Z、自由能 F 均相等，而一个格点和一个元胞的自由能之间的关系为



$$f(K,h)=L^{-d}f(\tilde{K},\tilde{h}) \qquad (2)$$

其中 L 为标度因子，d 是空间维数。参数 $(K,h)\to(\tilde{K},\tilde{h})$，并有

$$\tilde{K}=2K\left(\frac{e^{3K}+e^{-K}}{e^{3K}+3e^{-K}}\right)^2,$$

$$\tilde{h}=3h\left(\frac{e^{3K}+e^{-K}}{e^{3K}+3e^{-K}}\right) \qquad (3)$$

$$\tilde{\boldsymbol{K}}=\mathbf{R}_L(\boldsymbol{K}) \qquad (4)$$

式(3)或(4)称为重正化群变换方程，它给出了新老参数之间的变换关系，相当于把以 K，h 为坐标轴的参数空间中一点 $\boldsymbol{K}\equiv(K,h)$ 变成另一点 $\tilde{\boldsymbol{K}}\equiv(\tilde{K},\tilde{h})$。若将这种尺度变换和“粗粒化”继续下去，则得到一变换集 $\{(\mathbf{R}_L)^l\}=\{(\mathbf{R}_L)^0,(\mathbf{R}_L),(\mathbf{R}_L)^2,(\mathbf{R}_L)^3,\cdots\}$，由于无逆变换故称半群。为使式(2)与标度假设 $f(\lambda^a\varepsilon,\lambda^bB)=\lambda f(\varepsilon,B)\left(\varepsilon\equiv\frac{T-T_c}{T_c}\right)$ 的形式相同，以求出标度幂 a 和 b，关键的一步是把相关长度趋向无穷的临界点与重正化群变换的不动点联系起来。为此，由不动点方程 $\boldsymbol{K}^*=\boldsymbol{R}_L(\boldsymbol{K}^*)$ 确定不动点，考查与临界点对应的不稳定不动点邻域 $\boldsymbol{R}_L$ 的变换性质，可以求得

$$a=\ln\lambda_1/[(\ln L)d]=0.44,$$

$$b=\ln\lambda_2/[(\ln L)d]=0.68 \qquad (5)$$

式中 λ_1 和 λ_2 是 $\boldsymbol{R}_L$ 线性化矩阵的两个大于零的本征值，并可求出 $\lambda_1=1.62$，$\lambda_2=2.12$。由式(5)即可算出各临界指数的值

$$\alpha=2-\frac{1}{a}=-0.27,\ \beta=\frac{1-b}{a}=0.73,$$

$$\gamma=\frac{2b-1}{a}=0.82,\ \delta=\frac{b}{1-b}=2.13,$$

$$\eta=d(1-2b)+2=1.28,$$

$$\nu=\frac{1}{ab}=1.44 \qquad (6)$$

动量空间重正化群 momentum space renormalization group 简记为 MSRG。与 PSRG 相似，但选择连续变化的波矢 $\boldsymbol{q}$ 作为变量。MSRG 方法是以有效哈密顿和配分函数分别为

$$\mathscr{H}=-\frac{1}{2\Omega a^d}\sum_{\boldsymbol{q}}(C-K(\boldsymbol{q}))\,|S_{\boldsymbol{q}}|^2,$$

$$K(\boldsymbol{q})=2K\sum_{i=1}^{d}\cos q_i a \qquad (1)$$

$$Z=\int\cdots\int\prod_{\boldsymbol{q}}ds_{\boldsymbol{q}}\exp\left\{-\frac{1}{2\Omega a^d}\cdot\sum_{\boldsymbol{q}}(C-K(\boldsymbol{q}))\,|s_{\boldsymbol{q}}|^2\right\}$$

$$=\prod_{\boldsymbol{q}}\left[\frac{2\pi\Omega a^d}{C-K(\boldsymbol{q})}\right]^{1/2} \qquad (2)$$

的高斯模型为基础的。式中 $\Omega=Na^d$ 是总体积，N 为元胞总数。需对高斯模型作些变动：由于奇异性出现在 $\boldsymbol{q}=0$ 处，故将 $K(\boldsymbol{q})$ 在 $\boldsymbol{q}=0$ 处展成级数，则有 $K(\boldsymbol{q})\approx2K\left(d-\frac{a^2q^2}{2}\right)$；设 $B\neq0$，$\mathscr{H}$ 中应补上塞曼项 $h\sum_i s_i=h\sum_i\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{q}}s_{\boldsymbol{q}}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_i}=\frac{h}{a^d}\sum_{\boldsymbol{q}}s_{\boldsymbol{q}}\delta(\boldsymbol{q})=\frac{h}{a^d}s_0$；作为一个 d 维超立方，$\boldsymbol{q}$ 空间的第一布里渊区 $\left(-\frac{\pi}{a}\leqslant q_i<\frac{\pi}{a}\right)$ 可近似地用半径为 $\Lambda=\frac{\pi}{a}$ 的内切球代替，$d=2$ 的情形如下图所示。于是有

$$\mathscr{H}[\tilde{S}]\approx-\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^d}\int\cdots\int_{0\leqslant|\boldsymbol{q}|\leqslant\Lambda}d^d\boldsymbol{q}\cdot(\rho+q^2)\,\tilde{S}_{\boldsymbol{q}}\tilde{S}_{-\boldsymbol{q}}+\tilde{h}\tilde{S}_0 \qquad (3)$$

$$Z=\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{\boldsymbol{q}}D\tilde{S}_{\boldsymbol{q}}e^{\mathscr{H}[\tilde{S}]} \qquad (4)$$

$$\rho\equiv\left(\frac{C}{K}-2d\right)a^{-2},\ \tilde{S}_{\boldsymbol{q}}\equiv\sqrt{Ka^{2-d}}s_{\boldsymbol{q}},$$

$$\tilde{h}\equiv\frac{1}{a^d\sqrt{Ka^{2-d}}} \qquad (5)$$

式中 $\mathscr{H}[\tilde{S}]$ 表示 $\mathscr{H}$ 是自旋变量 $\tilde{S}_{\boldsymbol{q}}$ 的泛函数，Z 为泛函积分，$\tilde{S}_0\equiv\tilde{S}_{\boldsymbol{q}=0}$。将波矢空间划分为长波长区 $\left(0\leqslant|\boldsymbol{q}|<\frac{\Lambda}{L}\right)$ 和短波长区 $\left(\frac{\Lambda}{L}\leqslant|\boldsymbol{q}|<\Lambda\right)$ $(L>1)$，相应的自旋变量分

别为 $\varphi_{\boldsymbol{q}}$和 $\sigma_{\boldsymbol{q}}$,因此,在长波长区,$\mathcal{S}_{\boldsymbol{q}}=\varphi_{\boldsymbol{q}}$,短波长区 $\mathcal{S}_{\boldsymbol{q}}=\sigma_{\boldsymbol{q}}$。$\mathcal{H}$ 也划分为长波长区部分 $\mathcal{H}_L$ 和短波长区部分 $\mathcal{H}_S$,并进行"粗粒化",即在式(3)中对短波长部分积分,经运算得到

$$\mathcal{H}' \approx \mathcal{H}_L=-\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{0\leqslant|\boldsymbol{q}|<\frac{\Lambda}{L}}\cdots\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{q} \cdot(\rho+q^2)\varphi_{\boldsymbol{q}}\varphi_{-\boldsymbol{q}}+\hbar\varphi_0 \tag{6}$$

为使式(6)与(3)一致,需要(1)作尺度变换,令 $L\boldsymbol{q}=\boldsymbol{q}'$;(2)引入与 L 有关的自旋重标度因子 ζ:$\varphi(\boldsymbol{q})=\varphi\left(\frac{\boldsymbol{q}'}{L}\right)=\zeta(L)\mathcal{S}_{\boldsymbol{q}}$。且让 $\rho'\equiv L^2\rho$,$\hbar'\equiv\zeta\hbar$,这样选择 $\zeta(L)$,使得 $\zeta^2L^{-2-d}=1$。于是式(6)变为

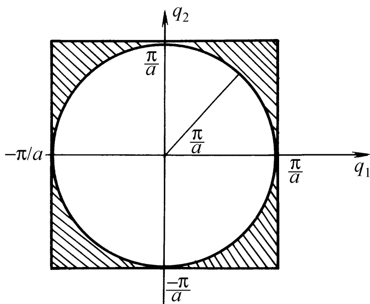
$$\begin{aligned}\mathcal{H}' &=-\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^d}L^{-2-d}\zeta^2\int_{0\leqslant|\boldsymbol{q}|<\Lambda}\cdots\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{q} \cdot(L^2\rho+q^2)\mathcal{S}_{\boldsymbol{q}}\mathcal{S}_{-\boldsymbol{q}}+\zeta\hbar\mathcal{S}_0 \\ &=-\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi)^d}\int_{0\leqslant|\boldsymbol{q}|\leqslant\Lambda}\cdots\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{q} \cdot(\rho'+q^2)\mathcal{S}_{\boldsymbol{q}}\mathcal{S}_{-\boldsymbol{q}}+\hbar'\mathcal{S}_0\end{aligned} \tag{7}$$

式(7)与(3)形式上相同,惟一的变化是参数从$(\rho,\hbar)\to(\rho',\hbar')$,即可写出新老参数间的变换关系

$$\rho'=L^2\rho,\ \hbar'=L^{1+\frac{d}{2}}\hbar \tag{8}$$

式(8)即为重正化群变换 $\boldsymbol{R}$。由不动点方程 $\boldsymbol{K}^*=\boldsymbol{R}(\boldsymbol{K}^*)$确定不动点,将 $\boldsymbol{R}$ 在不动点附近线性化,求出 $\boldsymbol{R}$ 矩阵的大于零的本征值 λ_K,λ_h,再利用标度假设 $f(\lambda^a\rho,\lambda^b\hbar)=\lambda f(\rho,\hbar)$,即可求得标度幂 a 和 b,从而算出各临界指数

$$a=\frac{\ln\lambda_K}{\ln\lambda}=\frac{2\ln L}{\mathrm{d}\ln L}=\frac{2}{d}$$



$$b=\frac{\ln\lambda_h}{\ln\lambda}=\frac{\left(1+\frac{d}{2}\right)\ln L}{d\ln L}=\frac{2+d}{2d} \tag{9}$$

$$\alpha=2-\frac{d}{2},\ \beta=\frac{d-2}{4},\ \gamma=1,$$

$$\delta=\frac{d+2}{d-2},\ \eta=0,\ \nu=\frac{1}{2} \tag{10}$$

八、量子统计系综和统计算符

Quantum Statistical Ensemble and Statistical Operator

量子统计系综　quantum statistical ensemble　是量子统计物理中为采用统计方法描述量子系统的统计性质和统计规律而引入的一个基本概念。量子力学中,用波函数或态矢量来描述量子系综的态,这种量子系综是所谓纯系综,它所属的各个系统处于相同的量子态。在量子统计中,则引入所谓混合系综的概念和求系综平均值的方法。混合系综定义为:大数处于相同的宏观条件下,彼此独立而全同并各处于某一量子态的系统的集合,它相当于许多纯系综的集合。各个纯系综所含系统数 $M_j(j=1,2,\cdots)$与混合系综所含总系统数 M 之比,等于混合系综中随意找出一个取样系统时,发现该取样系统处于各个量子态的相对概率。因此,需用一系列态矢量$|\psi_1(t)\rangle$,$|\psi_2(t)\rangle$,…,$|\psi_j(t)\rangle$,…,($|\psi_j(t)\rangle$是第 j 个纯系综的态矢量)和一系列概率

$$w_j=M_j/M(j=1,2,\cdots),\quad \sum_j w_j=1 \tag{1}$$

来描述混合系综。任意力学量 B(其算符是 $\hat{B}$)对量子统计系综即混合系综的统计平均值(即观测值)为

$$\begin{aligned}\langle B\rangle &=\sum_j w_jB_j \\ &=\sum_j w_j\langle\psi_j(t)|\hat{B}|\psi_j(t)\rangle\end{aligned} \tag{2}$$

式中 $B_j=\langle\psi_j(t)|\hat{B}|\psi_j(t)\rangle$是 B 对第 j 个纯系综的平均值。式(2)又可写做

$$\langle B\rangle=\sum_m\sum_n\langle n|\sum_j w_j|\psi_j(t)\rangle\langle\psi_j(t)|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle \quad (3)$$

其中$|m\rangle\equiv|\psi_m\rangle$。式(2)表明,力学量的观测值应是平均的结果。

混合系综和纯系综 mixed ensemble and pure ensemble 见"量子统计系综"。

统计算符$\hat{\rho}$ statistical operator $\hat{\rho}$ 又称密度矩阵,为便于描述量子统计系综的性质而引入的算符。它定义为

$$\hat{\rho}=\sum_j w_j|\psi_j(t)\rangle\langle\psi_j(t)| =\sum_j|j(t)\rangle w_j\langle j(t)| \quad (1)$$

其中$|j(t)\rangle\equiv|\psi_j(t)\rangle$为第$j$个纯系综的态矢量。任意力学量$\hat{B}$的统计平均值为

$$\langle\hat{B}\rangle=\sum_m\sum_n\langle n|\hat{\rho}|m\rangle\langle m|\hat{B}|n\rangle =\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{B}) \quad (2)$$

式中迹号 tr 表示取其后面的矩阵所有对角元之和。式(2)适用于任何表象。式(2)表明,力学量的观测值等于它的算符与统计算符乘积的迹。$\hat{\rho}$给出系统状态的详尽信息,它具有以下性质:(1)归一性 $\mathrm{tr}\,\hat{\rho}=\sum_m\rho_{mm}=1$;(2)厄米特性$\langle n|\hat{\rho}|m\rangle=\langle m|\hat{\rho}|n\rangle^*$;(3)正定性$\rho_{mm}\geqslant0$;(4)不变性,指由$\hat{\rho}$给出的平均值定义式(2)对表象变换是不变的,即 $\mathrm{tr}(\hat{B}\hat{\rho})=\mathrm{tr}(\hat{B}'\hat{\rho}')$,$\hat{B}$,$\hat{\rho}$和$\hat{B}'$,$\hat{\rho}'$是两个不同表象的量。

力学量算符的统计平均值 statistical average value of mechanical quantity operator 见"统计算符$\hat{\rho}$"。

统计算符$\hat{\rho}$的性质 properties of statistical operator $\hat{\rho}$ 见"统计算符$\hat{\rho}$"。

统计算符$\hat{\rho}$的运动方程 motion equation of statistical operator $\hat{\rho}$ 又称为量子刘维尔方程,是统计算符随时间演化所遵从的方程。利用薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|j(t)\rangle=\hat{H}|j(t)\rangle$,并将$\hat{\rho}$的定义式

$$\hat{\rho}=\sum_j|j(t)\rangle w_j\langle j(t)| \quad (1)$$

两端对时间t求导,同时引入量子泊松括号$\frac{1}{i\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}]=\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H})$,则有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}=[\hat{H},\hat{\rho}] \quad (2)$$

式(2)即为量子刘维尔方程。若哈密顿算符$\hat{H}$不显含时间,可得式(2)的形式解

$$\hat{\rho}(t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{\rho}(0)e^{i\hat{H}t/\hbar} =\hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^+(t) \quad (3)$$

式中$\hat{U}(t)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right]$称为演变算符,并满足初始条件$\hat{U}(0)=1$,$\rho(0)=\rho(t=0)$是$\rho(t)$的初始值。在能量表象中,$\hat{\rho}(t)$的矩阵元可表示为

$$\rho_{mn}(t)=\langle m|\hat{\rho}|n\rangle =\rho_{mn}(0)\exp[-i(E_m-E_n)t/\hbar] \quad (4)$$

对于定常态,$\hat{p}$与t明显无关,则式(2)右端量子泊松括号为零:

$$[\hat{H},\hat{\rho}]=0 \quad (5)$$

即定常态的统计算符与哈密顿算符是对易的。由式(4)可知,定常态出现在$\rho_{mn}(0)$为对角矩阵时的情况。在定常态情形下,可将$\hat{\rho}$和$\hat{H}$同时对角化。因此定常态的$\hat{\rho}$一般是$\hat{H}$和所有与$\hat{H}$对易的算符的函数。平衡态是定常态的一种特殊情况,上述结果对它也是成立的。在能量表象中,平衡系统的力学量B的统计平均值为

$$\langle\hat{B}\rangle=\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{B}=\sum_m\rho_m B_{mm} \quad (6)$$

这是因为对于 $E_m \neq E_n$，$\rho_{mn}=\rho_m\delta_{mn}$，$\rho_m$ 是系统处于量子态 $|m\rangle$（能量为 E_m）的概率。平衡系综的统计算符为

$$\hat{\rho}=\sum_j|\phi_j\rangle w_j\langle\phi_j| \quad (|\phi_j\rangle \text{ 是 } \hat{H} \text{ 的本征矢}) \tag{7}$$

如何确定分布概率 ρ_m 是平衡态量子统计的最基本问题。

定常态统计算符 statistical operator for steady state 见“统计算符 $\hat{\rho}$ 的运动方程”。

平衡态统计算符 statistical operator for equilibrium state 参见“统计算符 $\hat{\rho}$ 的运动方程”。

统计算符的薛定谔绘景 Schrödinger picture of statistical operator 描述量子系统的力学量算符 $\hat{B}$、密度矩阵 $\hat{\rho}(t)$ 及态矢量的一种方式。薛定谔绘景是采用一组与时间无关的基矢确定希尔伯特（Hilbert）空间里的态矢量，所以，态矢量的空间位置随时间变化，$\hat{\rho}(t)$ 也依赖于时间，而 $\hat{B}$ 不显含时间 t，系统随时间的演化完全由态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 给出。$\langle\hat{B}\rangle$ 可表示为

$$\langle\hat{B}\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}(t)\hat{B}) \tag{1}$$

由式(1)及量子刘维尔方程可得 $\hat{B}$ 的平均值随时间演化公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{B}\rangle=\left\langle\frac{\partial\hat{B}}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{B},\hat{H}]\rangle \tag{2}$$

若 $\dfrac{\partial\hat{B}}{\partial t}=0$ 且 $[\hat{B},\hat{H}]=0$，则 $\dfrac{\mathrm{d}\langle\hat{B}\rangle}{\mathrm{d}t}=0$，即若不显含时间的力学量算符 $\hat{B}$ 与哈密顿算符 $\hat{H}$ 对易，则它必定是系统的一个守恒量。$\langle\hat{B}\rangle$ 可写成

$$\begin{aligned}\langle\hat{B}\rangle&=\mathrm{tr}(\hat{\rho}(t)\hat{B})\\&=\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{\rho}(0)\,\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{B})\\&=\mathrm{tr}(\hat{\rho}(0)\hat{B}(t))\end{aligned} \tag{3}$$

式中 $\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}=\hat{U}(t)$ 是演化算符，且有 $\hat{U}(0)=1$，$\hat{B}(0)=\hat{B}$，式(3)中 $\hat{B}(t)$ 可写做

$$\begin{aligned}\hat{B}(t)&=\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{B}\,\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\\&=\hat{U}^{+}(t)B(0)\hat{U}(t)\end{aligned} \tag{4}$$

式(3)意味着还可引进与薛定谔绘景等价的另一种绘景——海森伯绘景，它采用一组在空间运动的基矢来确定希尔伯特空间里的态矢量，因此，系统的态矢量 $|\psi\rangle$ 和 $\hat{\rho}$ 都不随时间变化，而 $\hat{B}$ 则明显依赖于时间，系统的演化规律完全由 $\hat{B}$ 的时间行为给出。式(4)是算符 $\hat{B}$ 的海森伯绘景表式或 $\hat{B}$ 在两种绘景之间的变换关系。由式(4)可得海森伯方程

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{B}(t)}{\mathrm{d}t}&=\frac{1}{i\hbar}(\hat{B}(t)\hat{H}-\hat{H}\hat{B}(t))\\&=\frac{1}{i\hbar}[\hat{B}(t),\hat{H}]\end{aligned} \tag{5}$$

乍一看两种绘景是对立的，但它们只是描述方式不同，给出的 $\langle\hat{B}\rangle$ 则是相同的。

统计算符的海森伯绘景 Heisenberg picture of statistical operator 见“统计算符的薛定谔绘景”。

力学量平均值的时间变率方程 equation of time change rate of mechanical quantity average value 见“统计算符的薛定谔绘景”。

海森伯方程 Heisenberg equation 见“统计算符的薛定谔绘景”。

微正则系综的统计算符 statistical operater of microcanonical ensemble 以 Ω 表示孤立系统可能的微观态数，微正则分布可写做

$$w_j=\begin{cases}\Omega^{-1}(E_j,N,V), & E\leqslant E_j\leqslant E+\Delta E\\ 0, & E_j<E \text{ 和 } E_j>E+\Delta E\end{cases}$$

$$\left(\sum_j w_j=1\right) \tag{1}$$

统计算符 $\hat{\rho}=\sum_j|\psi_j>w_j<\psi_j|$ 在坐标表

象中相应于(1)的矩阵形式为

$$\rho(x,x')=\Omega^{-1}(E,N,V)\cdot\sum_{1\leqslant j\leqslant\Omega}\psi_j(x)\psi_j^*(x') \quad (2)$$

其中 x 代表 N 个粒子的坐标以及自旋,$\{\psi_j\}$($j=1,2,\cdots,\Omega$)是系统的哈密顿算符 $\hat{H}$ 的本征函数。微正则系综的 $\hat{\rho}$ 还可表示为

$$\hat{\rho}=\Omega^{-1}(E,N,V)\Delta(H-E) \quad (3)$$

式中 $\Delta(H-E)$ 当 $0\leqslant(H-E)\leqslant\Delta E$ 时等于1,而在此间隔外为零。系统的熵为

$$S=\langle\hat{\zeta}\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{\zeta})=-k_B\mathrm{tr}(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}) \quad (4)$$

其中 $\hat{\zeta}$ 是熵算符,它定义为

$$\hat{\zeta}=-k_B\ln\hat{\rho} \quad (5)$$

在密度矩阵对角化表象中,利用式(1),则有

$$S=-k_B\sum_j w_j\ln w_j=k_B\ln\Omega(E,N,V) \quad (6)$$

微正则系综的熵算符 entropy operater of microcanonical ensemble 见“微正则系综的统计算符”。

正则系综的统计算符 statistical operater of canonical ensemble 正则分布和正则配分函数 Z 分别表示为

$$w_j=Z^{-1}(T,V,N)\exp(-E_j/k_BT),$$
$$Z(T,V,N)=\sum_j\exp(-E_j/k_BT) \quad (1)$$

由定义式 $\hat{\rho}=\sum_j|\psi_j\rangle w_j\langle\psi_j|$,并将算符 $\exp\left[-\frac{\hat{H}}{k_BT}\right]$ 作泰勒展开,则有

$$\hat{\rho}=\frac{\exp(-\hat{H}/k_BT)}{Z}=\exp\left[-\frac{\hat{H}}{k_BT}\right]\Big/\mathrm{tr}\exp\left[-\frac{\hat{H}}{k_BT}\right],$$

$$Z(T,V,N)=\mathrm{tr}\,\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT} \quad (2)$$

其中利用了态矢量 $|\psi_j\rangle$ 的完备性:$\sum_j|\psi_j\rangle\langle\psi_j|=1$。在坐标表象里统计算符 $\hat{\rho}$ 取如下形式

$$\rho(x,x')=Z^{-1}(T,V,N)\cdot\sum_j\mathrm{e}^{-E_j/k_BT}\psi_j^*(x')\psi_j(x),$$

$$Z(T,V,N)=\sum_j\int\psi_j^*(x)\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT}\psi_j(x)\mathrm{d}x \quad (3)$$

若取 $\hat{H}$ 为对角化表象,使 $\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT}$ 和 $\hat{H}$ 同时对角化,则配分函数变为

$$Z=\sum_{(j,\alpha)}\exp(-E_j/k_BT) \quad (4)$$

式中 E_j 是 $\hat{H}$ 的本征值,α 是其他的量子数,与 E_j 及 α 对应的本征矢为 $|j,\alpha\rangle$。闭系力学量 $\hat{B}$ 的观测值即统计平均值为

$$\langle\hat{B}\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{B})=Z^{-1}(T,V,N)\mathrm{tr}(\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT})=\mathrm{tr}(\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT})/\mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\hat{H}/k_BT}) \quad (5)$$

正则系综的统计平均值公式 statistical average value formula of canonical ensemble 见“正则系综的统计算符”。

巨正则系综的统计算符 statistical operator of grand canonical ensemble 巨正则分布和巨配分函数 $\mathscr{Z}$ 分别表示为

$$w_{j(N)}=\mathscr{Z}^{-1}(T,V,\mu)\exp\left[\frac{-1}{k_BT}(E_{j(N)}-\mu N)\right],$$

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\sum_N\sum_{j(N)}\exp\left[-\frac{1}{k_BT}(E_{j(N)}-\mu N)\right] \quad (1)$$

统计算符 $\hat{\rho}=\sum_j|\psi_j>w_j<\psi_j|$ 及巨配分函数取如下形式

$$\hat{\rho}_N=\mathscr{Z}^{-1}(T,V,\mu)\exp\left[-\frac{1}{k_BT}(\hat{H}-\mu\hat{N})\right],$$

$$\mathscr{Z}(T,V,\mu)=\mathrm{tr}\exp\left[-\frac{1}{k_BT}(\hat{H}-\mu\hat{N})\right] \quad (2)$$

若取 $\hat{H}$ 和 $\hat{N}$ 同时对角化的表象,则有

$\mathscr{Z}(T,V,\mu)$

$$= \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{j(N),\alpha} \exp\left[-\frac{1}{k_B T}(E_{j(N)} - \mu N) \right] \quad (3)$$

式中 N 是 $\hat{N}$ 的本征值，$E_{j(N)}$ 是相应的能量本征值，α 为其他的量子数，$\sum\limits_{j(N),\alpha}$ 表示在 N 固定下对 j,α 求和。开系力学量 B 的统计平均值为

$$\langle \hat{B} \rangle_N = \mathrm{tr}(\hat{\rho}_N \hat{B}) = \mathscr{Z}^{-1}(T, V, \mu)\mathrm{tr}\left[\hat{B} e^{-\frac{1}{k_B T}(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right]$$

$$= \mathrm{tr}\left[\hat{B} e^{-\frac{1}{k_B T}(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right] \Big/ \mathrm{tr}\left[e^{-\frac{1}{k_B T}(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right] \quad (4)$$

巨正则系综的统计平均值公式 statistical average value formula of grand canonical ensemble 见“巨正则系综的统计算符”。

统计算符的布洛赫方程 Bloch equation of statistical operator 正则系综的统计算符 $\hat{\rho}$ 所遵从的微分方程。$\hat{\rho}$ 是描述量子系统统计性质的矩阵，它与诸热力学量有着密切的联系。因此，确定 $\hat{\rho}$ 是量子统计物理的基本问题。根据正则系综统计算符的表示式，将未归一化的 $\hat{\rho}$ 定义为

$$\hat{\rho}(\beta) = e^{-\beta \hat{H}} \quad (\hat{H}\text{：系统的哈密顿算符}) \quad (1)$$

它是参量 $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$ 的函数。式(1)在能量表象中的矩阵元为

$$\rho_{ij}(\beta) = \delta_{ij} \exp(-\beta E_i) \quad (2)$$

将式(2)两端对 β 求导，再回复到算符的形式，即得到布洛赫方程

$$-\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial \beta} = \hat{H}\hat{\rho}, \quad \hat{\rho}(0) = 1 \quad (3)$$

式(3)中第 2 式为初始条件。在坐标表象里式(3)取如下形式

$$-\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = H\left(x, \frac{\partial}{\partial x} \right) \rho(x, x'; \beta),$$

$$\rho(x, x'; 0) = \delta(x - x') \quad (4)$$

例如，对于一维自由粒子 $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$，由式(4)得到一扩散型方程及其解

$$-\frac{\partial \rho(x, x'; \beta)}{\partial \beta} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \rho(x, x'; \beta),$$

$$\rho(x, x'; \beta) = \left(\frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{1/2} \cdot \exp\left[-\frac{m}{2\hbar^2 \beta}(x - x')^2 \right] \quad (5)$$

若考虑一长为 L 的一维系统，由式(5)可求得配分函数 Z 和自由能 F 为

$$Z = \int_0^L \rho(x, x; \beta) \mathrm{d}x = L\left(\frac{m}{2\pi \hbar^2 \beta} \right)^{1/2} \quad (6)$$

$$F = -\beta^{-1} \ln Z = (2\beta)^{-1} \ln \frac{2\pi \hbar^2 \beta}{m L^2} \quad (7)$$

坐标表象中的布洛赫方程 Bloch equation in coordinate representation 见“统计算符的布洛赫方程”。

统计算符的微扰展开式 perturbation expanded form of statistical operator 用微扰展开法求得的布洛赫方程近似解。实际上只有很少数的系统哈密顿量 H 可严格求解布洛赫方程，然而，若 H 与 H_0 相差很小，即有

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \hat{H}_1 \ll \hat{H}_0 \quad (1)$$

并且，$\hat{\rho}_0$ 满足布洛赫方程

$$\frac{\partial \hat{\rho}_0}{\partial \beta} = -\hat{H}_0 \hat{\rho}_0 \quad (2)$$

就可利用 $\hat{\rho}_0 = \exp(-\beta \hat{H}_0)$ 获得 $\hat{\rho}$ 的渐近解，这就是微扰展开法。由于 $\hat{\rho}$ 非常靠近 $\hat{\rho}_0$，故可认为 $\dfrac{\hat{\rho}}{\hat{\rho}_0} = e^{\beta \hat{H}_0}\hat{\rho}$ 随 β 缓慢变化，将 $e^{\beta \hat{H}_0}\hat{\rho}$ 对 β 求导，并从 0 至 β 积分，即可得到

$$\hat{\rho}(\beta) = \hat{\rho}_0(\beta) - \int_0^\beta \hat{\rho}_0(\beta - \beta') \hat{H}_1 \hat{\rho}(\beta') \mathrm{d}\beta' \quad (3)$$

其中利用了 $e^{\beta \hat{H}_0}\hat{\rho}\big|_{\beta=0} = 1$，$e^{-\beta \hat{H}_0 + \beta' \hat{H}_0} = \hat{\rho}_0(\beta - \beta')$，用迭代法对式(3)求解，得到

$$\hat{\rho}(\beta)=\hat{\rho}_0(\beta)-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\beta'[\hat{\rho}_0(\beta-\beta')\hat{H}_1\hat{\rho}_0(\beta')]$$
$$+\int_0^{\beta}\mathrm{d}\beta'\int_0^{\beta'}\mathrm{d}\beta''[\hat{\rho}_0(\beta-\beta')\hat{H}_1\hat{\rho}_0(\beta'-\beta'')\hat{H}_1\hat{\rho}_0(\beta'')]$$
$$-\int_0^{\beta}\mathrm{d}\beta'\int_0^{\beta'}\mathrm{d}\beta''\int_0^{\beta''}\mathrm{d}\beta'''(\hat{\rho}_0\hat{H}_1\hat{\rho}_0\hat{H}_1\hat{\rho}_0\hat{H}_1\hat{\rho}_0)+\cdots \quad (4)$$

若取式(4)右端前两项或将式(3)积分号内$\hat{\rho}(\beta')$代以$\hat{\rho}_0(\beta')$即得一级修正。对于坐标表象,则有

$$\rho(x,x';\beta)\approx\rho_0(x,x';\beta)-\int_{-\infty}^{\infty}\int_0^{\beta}\rho_0(x,x'';\beta-\beta')V(x'')\cdot\rho_0(x'',x';\beta)\mathrm{d}\beta'\mathrm{d}x'' \quad (5)$$

式(5)是一级修正式,式中 $V(x)$是微扰哈密顿算符$\hat{H}_1$的坐标表象

$$\langle x''|\hat{H}_1\rho_0(\beta')|x'\rangle=V(x'')\rho_0(x'',x';\beta') \quad (6)$$

维格纳函数 Wigner function 对于量子力学系统,不能同时给定粒子的位置和动量,故不能定义相空间中一具有概率密度意义的分布函数。但维格纳首先证明,可引入一形式上与经典概率密度相似的函数,且在经典极限下趋于经典概率密度,这个函数称为维格纳函数。定义与力学量$\hat{B}$的坐标表象 $B(x,x')\equiv\langle x|B|x'\rangle$对应的维格纳表象 $B_{\mathrm{W}}(p,q)$:

$$B_{\mathrm{W}}(p,q)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pl/\hbar}\langle x\mid B\mid x'\rangle\mathrm{d}l \quad (1)$$

其中 $q=\dfrac{x+x'}{2}$, $l=x-x'$

或 $x=q+\dfrac{l}{2}$, $x'=q-\dfrac{l}{2}$ (2)

即把坐标表象中的 x 和 x'的重心作为位置坐标 q,而将其差的傅氏变换作为与动量 p 对应的参数。$B_{\mathrm{W}}(p,q)$是相空间中的函数而不是算符。由式(1)统计算符$\hat{\rho}$的维格纳表象应为

$$f_W(p,q)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pl/\hbar}\langle x\mid\rho\mid x'\rangle\mathrm{d}l \quad (3)$$

$f_W(p,q)$称为维格纳(分布)函数,它的逆变换是

$$\rho(x,x')=\langle x\mid\rho\mid x'\rangle=\int\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x')/\hbar}f_W\left(p,\frac{x+x'}{2}\right)\frac{\mathrm{d}p}{(2\pi\hbar)^{3N}} \quad (4)$$

根据力学量$\hat{B}$的统计平均值的定义,利用式(4)和(1)并作变换$(x,x')\rightarrow(x',x)\rightarrow(q,l)$,则有

$$\langle B\rangle=\iint B(x',x)\rho(x,x')\mathrm{d}x\mathrm{d}x'=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\iint B_{\mathrm{W}}(p,q)f_{\mathrm{W}}(p,q)\mathrm{d}p\mathrm{d}q \quad (5)$$

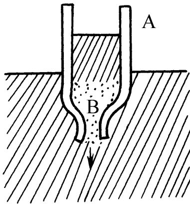
可见,有如下对应关系:$\hat{B}\leftrightarrow B_W$,$\hat{\rho}\leftrightarrow f_W$,$\mathrm{tr}\leftrightarrow\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}}\iint\mathrm{d}p\mathrm{d}q$。这就意味着:量子统计中的统计平均值若采用维格纳表象,则可表示为经典相空间中由维格纳分布函数定义的平均值。若选择离散状态作为基矢,则迹 tr 的计算是对那些基矢求和,tr 和积分的对应关系意味着每个自由度占据相空间的体积 $2\pi\hbar$ 对应于一个量子态。在 $\hbar\rightarrow0$ 经典极限下,量子统计力学归结为经典统计力学,维格纳函数变为经典相空间概率分布函数。

维格纳表象及其平均值 Wigner representation and its average value 见“维格纳函数”。

九、量子流体的统计理论
Statistical Theory of Quantum Fluid

量子流体 quantum fluid 量子统计效应起主导作用的存在相互作用的多粒子流体系统。当温度足够低和/或密度足够高,以致热波长$\lambda_T=\left(\dfrac{h^2}{2\pi mk_BT}\right)^{1/2}$与粒子的平均间距$\mathrm{d}=n^{-1/3}$可比拟时,量子统计效应显著,并对系统的热力学行为起主要作用。量子流体显现丰富多彩的物理现象和重要的物理性质,如金属的超导性、液 He 的超流性等。量子流体着重研究弱耦合简并性的量子系统。

液 HeⅡ的性质　property of liquid HeⅡ　实验上发现，在发生 HeⅠ-HeⅡ 相变（λ 相变）的温度 $T_\lambda=2.18\text{K}$ 以下，液 HeⅡ 有一系列奇特的性质。(1)超流性。HeⅡ 在极细的直径量级为 $0.1\mu\text{m}$ 的毛细管中的流阻几乎为零，并在临界速度 v_c 以上，超流性消失；(2)黏滞性。用圆盘法测得 HeⅡ 的黏性系数要比用毛细管法测得的至少大 10^6 倍，且前者明显地依赖于温度，随 $T\to 0\,K$ 而趋于零；(3)喷泉效应。如下图所示，A 为一容器，B 是多孔塞。当 HeⅡ 由 A 中通过 B 流出时，A 内 HeⅡ 的温度升高，反之，若提高 A 内的温度，则其中 HeⅡ 的液面上升，若 A 本身是一毛细管，HeⅡ 就由上口喷出；(4)导热性。HeⅡ 的导热率约为室温下铜的 800 倍，它与通常流体完全不同，热导不与温度梯度成正比，无沸腾现象。



喷泉效应实验装置图

二流体模型　two-fluid model　L. Tisza (1938)和朗道(Landau)(1940)提出的模型。该模型基本假设如下：(1)HeⅡ 含质量密度各为 ρ_n 和 ρ_s 的正常流体和超流体两种成分，总质量密度 $\rho=\rho_n+\rho_s$。正常成分具有熵和黏滞性，而超流成分则都没有。朗道将超流成分视为理想背景流体，而把正常成分看做在理想背景流体上的一些元激发；(2)当 $T=T_\lambda$ 时，$\rho_n=\rho$，$\rho_s=0$，全是正常流体，$T=0\,K$ 时，$\rho_n=0$，$\rho_s=\rho$，全是超流体，在 $0\,K$ 和 T_λ 之间，$\frac{\rho_s}{\rho}$ 和 $\frac{\rho_n}{\rho}$ 均是 T 的函数，其具体形式由实验确定；(3)以 $\boldsymbol{v}$、$\boldsymbol{v}_n$ 和 $\boldsymbol{v}_s$ 分别表示 HeⅡ 的速度场、正常成分和超流成分的速度场，总质量流为 $\rho\boldsymbol{v}=\rho_n\boldsymbol{v}_n+\rho_s\boldsymbol{v}_s$。还假定两种成分之间可相对流动而无动量交换即无摩擦。$\boldsymbol{v}_s$ 是无旋的即 $\nabla\times\boldsymbol{v}_s=0$。据上所述可知，纯超流成分流动时，就不会携带熵，也不会传热，必定是热力学可逆过程。用二流体模型可以圆满地解释 HeⅡ 的一些奇特性质的实验结果。

朗道超流理论　Landau theory of superfluidity　将液 HeⅡ 视为受弱激发的量子玻色系统。弱激发态对基态的偏离呈现为在稳定的背景(超流体成分)上产生了由准粒子组成的气体(正常流体成分)。若温度很低，因元激发数密度很小，故可将它们当作准粒子理想气体。

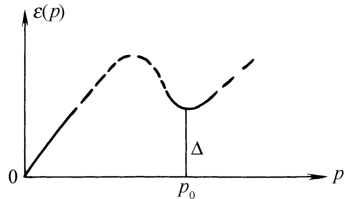
(1)准粒子能谱。根据实验事实：当 $T\ll T_\lambda$(λ 相变温度)时，比热容 $C_v\propto T^3$；当 T 稍提高时，C_v 含一按 $e^{-\Delta/k_BT}$ 规律变化的附加项。朗道认为小动量情形的元激发是声子，其能量为

$$\varepsilon=u_1 p\quad(u_1=23800\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}\text{为第一声声速})\tag{1}$$

推测在较大动量时，被称为旋子的准粒子能谱为

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\Delta+\frac{(p-p_0)^2}{2m^*}(\Delta\text{:能隙常数})\tag{2}$$

下图表示朗道假设的准粒子能谱，虚线部分则不清楚。两种准粒子都是玻色子。



朗道假设的 HeⅡ 的准粒子能谱图

(2)热力学性质。将被激发的准粒子集合视为理想玻色气体，准粒子数不确定，可由平衡条件 $\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_{T,V}=\mu=0$ 决定。利用自由能公式 $F=-k_BT\ln\mathscr{Z}$ 和玻色分布计算诸热力学量。对于声子部分，则有

$$F_{\text{ph}}=-\frac{4}{45}\pi^5 Vk_BT\left(\frac{k_BT}{hu_1}\right)^3,$$

$$U_{\text{ph}}=\frac{4}{15}\pi^5 Vk_BT\left(\frac{k_BT}{hu_1}\right)^3,$$

$$(C_v)_{ph}=\frac{16}{15}\pi^5 Vk_B\left(\frac{k_BT}{hu_1}\right)^3,$$

$$\langle N\rangle_{ph}=8\pi\zeta(3)V\left(\frac{k_BT}{hu_1}\right)^3 \qquad (3)$$

其中 $\zeta(3)=\sum_{l=1}^{\infty}\frac{1}{l^3}\approx 1.202$，$(C_v)_{ph}\propto T^3$ 与实验结果相符。对于旋子部分，若 $T\leqslant 2K$，则旋子能量$\gg k_BT$，可近似地用玻尔兹曼分布，可得

$$F_r=-k_BT\frac{4\pi p_0^2V}{h^3}(2\pi m^*k_BT)^{1/2}$$

$$\cdot e^{-\Delta/k_BT}=-k_BT\langle N_r\rangle,$$

$$U_r=\langle N_r\rangle\left(\Delta+\frac{1}{2}k_BT\right),$$

$$S_r=\langle N_r\rangle k_B\left(\frac{3}{2}+\frac{\Delta}{k_BT}\right),$$

$$(C_v)_r=\langle N_r\rangle k_B\left[\frac{3}{4}+\frac{\Delta}{k_BT}+\left(\frac{\Delta}{k_BT}\right)^2\right] \qquad (4)$$

当 $T\to 0K$ 时，$(C_v)_r$ 以指数方式趋于零。HeⅡ的各热力学量是旋子部分(r)和声子部分(ph)相应的热力学量之和。当 $T<0.5K$ 时，声子部分起主要作用，$T>1K$ 时，旋子部分是主要的。

(3)正常流体成分的质量密度 ρ_n。ρ_n 就是准粒子理想气体的质量密度。因有效质量 m^* 是未知的，故不能直接由准粒子数密度来确定 ρ_n，但 $\rho_n=\frac{\boldsymbol{P}}{\boldsymbol{v}}$，$\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 是准粒子气体的动量密度和整体运动速度。求出准粒子平均占有数为 $\langle n(\boldsymbol{p})\rangle=\frac{1}{\exp(\varepsilon-\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p}/k_BT)-1}$，于是

$$\rho_n=\frac{\boldsymbol{P}}{\boldsymbol{v}}=\frac{1}{\boldsymbol{v}}\frac{1}{h^3}\int n(\varepsilon-\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p})\boldsymbol{p}\,d\boldsymbol{p}$$

$$\approx-\frac{1}{\boldsymbol{v}}\frac{1}{h^3}\int d\boldsymbol{p}\,\boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p})\frac{\partial n}{\partial\varepsilon}$$

$$=-\frac{4\pi}{3h^3}\int_0^{\infty}\frac{\partial n}{\partial\varepsilon}p^2dp$$

$$=(\rho_n)_{ph}+(\rho_n)_r \qquad (5)$$

$$(\rho_n)_{ph}=\frac{16\pi^5h}{45u_1}\left(\frac{k_BT}{hu_1}\right)^4,$$

$$(\rho_n)_r=\frac{4\pi p_0^4}{3h^3}\left(\frac{2\pi m^*}{k_BT}\right)^{1/2}e^{-\Delta/k_BT}$$

$$=\frac{p_0^2}{3k_BT}\frac{\langle N_r\rangle}{V} \qquad (6)$$

数值计算结果是：当 $T<0.3K$ 时，声子的贡献为主，$T>1K$ 时，旋子为主，$T\approx 0.6K$ 时，两者可相比拟。在 T 不很靠近 T_λ 时，得到的 $\rho_n(T)$ 结果与实验符合，但当 T 接近 T_λ 时，则与实验不符，因为此时系统不是弱激发了。式(6)给出旋子有效质量 $m^*=p_0^2/3k_BT\propto\frac{1}{T}$，它是氦的质量的10～15倍。

(4)超流的临界速率。$T=0K$ 时，HeⅡ完全是超流成分，无元激发。超流体以速度 $\boldsymbol{v}$ 作整体运动时，有

$$\boldsymbol{P}=M\boldsymbol{v},\ E=\frac{1}{2}Mv^2=\frac{P^2}{2M} \qquad (7)$$

式中 $\boldsymbol{P}$、E 和 M 分别是超流体的动量、能量和质量。若超流体中出现一个元激发，其动量和能量来自 $\boldsymbol{P}$ 和 E 的减少：$\boldsymbol{p}=-\delta\boldsymbol{P}$，$\varepsilon(\boldsymbol{p})=-\delta E=-\boldsymbol{v}\cdot\delta\boldsymbol{P}$，则有

$$\varepsilon(\boldsymbol{p})=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{p}\leqslant vp \quad 或 \quad v\geqslant\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{p} \qquad (8)$$

表明只有当超流体的宏观流动速率大于 $\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{p}$ 值时，才可能出现元激发，反之，v 比 $\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{p}$ 的一切可能的值都小时，就不可能因流动而产生元激发。朗道提出流体维持超流状态的条件即超流判据

$$v<\left(\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{p}\right)_{min}\equiv v_c \quad (v_c:超流的临界速率) \qquad (9)$$

当 $T\neq 0K$ 时，上述结论仍然成立，但此时超流体原已存在元激发，式(9)表示液体中不因宏观流动而产生新的元激发。朗道理论的缺陷在于所得到的 $v_c\left(v_c\approx\frac{\Delta}{p}=60\,m\cdot s^{-1}\right)$ 比实验值大很多。费曼提出 v_c 决定于HeⅡ中另一种称之为量子涡旋的激发，理论计算与实验基本符合。

液HeⅡ的准粒子能谱 quasiparticle energy spectrum of liquid HeⅡ 见“朗道超流理论”。

液HeⅡ的热力学性质 thermodynamical property of liquid HeⅡ 见“朗道超流理论”。

液 He Ⅱ 的正常流体成分的质量密度 mass density of normal fluid composition for liquid He Ⅱ 见“朗道超流理论”。

超流的临界速率 critical speed of superflow 见“朗道超流理论”。

简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论 Bogoliubov theory for degeneracy near ideal Bose gas (repulsive potential) 博戈留波夫提出一种稀薄的具有弱排斥相互作用的简并性近理想玻色气体模型。要求散射长度 $a>0$ 的排斥势,总散射面积为 $4\pi a^2$,考虑低密度和低温情形,可将粒子间相互作用当做一种在理想气体上的微扰,并有 $\frac{a}{\lambda_T}\ll 1$,$\lambda_T\approx d\ll L$,$\frac{a}{n}\ll 1$,λ_T 是热波长,d 是粒子平均间距,L 是容器线度,n 为粒子数密度。因此,气体是简并的,量子效应显著。

(1)哈密顿量。考虑 N 个自旋为零的粒子,系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 由理想气体的哈密顿 $\hat{H}_0$ 和相互作用哈密顿 $\hat{H}_i$ 组成。在二次量子化表象中,有

$$\hat{H}_0=\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{p^2}{2m}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}},$$

$$\hat{H}_i=\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\boldsymbol{p}_1',\boldsymbol{p}_2'}{}'\left[\langle \boldsymbol{p}_1'\boldsymbol{p}_2'\mid\hat{v}\mid \boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2\rangle\cdot\hat{a}_{\boldsymbol{p}_1'}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}_2'}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}_2}\hat{a}_{\boldsymbol{p}_1}\right]\tag{1}$$

式中 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}$,$\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ 分别为动量 $\boldsymbol{p}$ 的单粒子态 $\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}$ 的产生和消灭算符,遵从对易关系。相应的粒子数算符为 $n_{\boldsymbol{p}}=\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$。$\sum'$ 是指求和时受到动量守恒条件 $\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_1'+\boldsymbol{p}_2'$ 的制约。相互作用矩阵元 $\langle\boldsymbol{p}_1'\boldsymbol{p}_2'\mid\hat{v}\mid\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{p}_2\rangle=\frac{1}{V}\int d\boldsymbol{r}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}v(\boldsymbol{r})\approx\frac{v_0}{V}\left(v_0=\frac{4\pi\hbar^2a}{m}\right)$,$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}_1-\boldsymbol{p}_1'=\boldsymbol{p}_2'-\boldsymbol{p}_2$ 代表散射过程中动量的转移。博戈留波夫认为,当系统处于低激发态时,占据 $\boldsymbol{p}\neq 0$ 态的粒子数很少,仍有数量级为 N 的粒子处于 $\boldsymbol{p}=0$ 的态,可将 $\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}$,$\hat{a}_{\boldsymbol{p}}$ 视为小量。可得到 $\hat{H}$ 的近似形式

$$\hat{H}=\frac{N^2v_0'}{2V}+\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{Nv_0}{V}\right)\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}+\frac{Nv_0}{2V}\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{a}_{-\boldsymbol{p}}^{+}+\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{-\boldsymbol{p}}),$$

$$v_0'\approx\frac{4\pi a\hbar^2}{m}\left(1+\frac{4\pi a\hbar^2}{V}\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\frac{1}{p^2}\right)\tag{2}$$

(2)博戈留波夫变换。为使式(2)对角化,引入线性变换

$$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}=\frac{1}{\sqrt{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}+\beta_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{-\boldsymbol{p}}^{+}),$$

$$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}=\frac{1}{\sqrt{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2}}(\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{+}+\beta_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{-\boldsymbol{p}})\tag{3}$$

即博戈留波夫变换。$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}$,$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ 是新的产生和消灭算符。可得

$$\beta_{\boldsymbol{p}}=1+\frac{p^2V}{2mNv_0}-p\sqrt{\frac{V}{2mNv_0}}\sqrt{\frac{p^2V}{2mNv_0}+2}\tag{4}$$

$\beta_{\boldsymbol{p}}$ 是小于 1 的实数。$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}$,$\hat{b}_{\boldsymbol{p}}$ 也满足对易关系。式(2)变为

$$\hat{H}=E_0+\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\varepsilon(\boldsymbol{p})\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}=E_0+\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\varepsilon(\boldsymbol{p})\hat{n}_{\boldsymbol{p}}$$

$$\hat{n}_{\boldsymbol{p}}=\hat{b}_{\boldsymbol{p}}^{+}\hat{b}_{\boldsymbol{p}}\tag{5}$$

其中 E_0、$\varepsilon(\boldsymbol{p})$ 和 $\hat{n}_{\boldsymbol{p}}$ 分别是基态能量、准粒子能谱和准粒子数算符。博氏变换的物理意义是从原来的粒子数表象(对于 $\hat{H}_0$ 是对角的)到准子数表象的一种变换,它将相互作用的玻色气体转换为准粒子的理想玻色气体。

(3)基态能量与压强。式(5)中基态能量 E_0 为

$$E_0=\frac{2\pi a\hbar^2N^2}{mV}+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\left\{\left[\frac{p^2}{2m}\left(\frac{8\pi a\hbar^2N}{mV}+\frac{p^2}{2m}\right)\right]^{1/2}\right.$$

$$+\left(\frac{4\pi a\hbar^2 N}{mV}\right)^2\frac{m}{p^2}-\frac{p^2}{2m}-\frac{4\pi a\hbar^2 N}{mV}\Bigg\}$$

(6)

它意味着相互作用系统的基态已不是所有粒子都处在零动量态,相互作用导致基态中掺入 $\boldsymbol{p}\neq 0$ 的态。将式(6)中求和代以积分求得粒子平均基态能

$$\frac{E_0}{V}=\frac{2\pi a\hbar^2 n}{m}\left[1+\frac{128}{15\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2}\right]$$

$$\left(n=\frac{N}{V}\right) \tag{7}$$

式(7)可看做气体在低温下,基态按小参量 $(na^3)^{1/2}$ 展开式的前两项。此结果先由李–杨采用二体碰撞法导出,之后他们和黄克逊运用赝位势法算出同样结果。系统的基态压强和绝对零度时声速分别为

$$p_0=-\left(\frac{\partial E_0}{\partial V}\right)$$

$$=\frac{2\pi a\hbar^2 n^2}{m}\left[1+\frac{64}{5\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2}\right],$$

$$c_0=\sqrt{\frac{\partial p_0}{\partial \rho}}=\sqrt{\frac{\partial p_0}{\partial (mn)}}$$

$$=\sqrt{\frac{4\pi a\hbar^2 n}{m^2}\left[1+\frac{16}{\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2}\right]}^{\,1/2} \tag{8}$$

(4)准粒子能谱。式(5)中的准粒子能谱可表示为

$$\tilde{\varepsilon}(\boldsymbol{p})=\left[\frac{p^2}{2m}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{8\pi a\hbar^2 N}{mV}\right)\right]^{1/2}$$

$$=\left[c^2p^2+\left(\frac{p^2}{2m}\right)^2\right]^{1/2}$$

$$\left(c=\frac{(4\pi a\hbar^2 n)^{1/2}}{m}\text{为声速}\right) \tag{9}$$

可见,对于大动量,即得自由粒子能谱公式 $\varepsilon(\boldsymbol{p})\approx\frac{p^2}{2m}$,对于小动量,则有 $\varepsilon(\boldsymbol{p})=cp$,近理想玻色气体小动量的准粒子就是声子。朗道超流判据 $v<\left(\frac{\varepsilon(\boldsymbol{p})}{p}\right)_{\min}\equiv v_c$ 要求 v 满足 $v<\left(\frac{\tilde{\varepsilon}(p)}{p}\right)=c(c>0)$ 时,保持超流状态,这表明具有排斥势的近理想玻色气体有超流性,但其元激发谱只是小动量区声子,而无旋子部分。

(5)准粒子的平衡分布。式(5)表明,系统激发态的能量本征值是单个准粒子能量之和,故处于低激发态的系统可视为准粒子组成的理想气体。准粒子数不固定,故化学势 $\mu=0$,于是准粒子的平衡分布应满足如下玻色分布

$$\langle\tilde{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle=\frac{1}{e^{\tilde{\varepsilon}(\boldsymbol{p})/k_BT}-1}(\boldsymbol{p}\neq 0) \tag{10}$$

$\langle\tilde{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle$ 为统计平衡态动量为 $\boldsymbol{p}$ 的平均激发数。当 $T=0\text{K}$ 时,$\langle\tilde{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle=0$。

(6)实际粒子的平衡分布。它是粒子数算符的统计平均

$$\langle\hat{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle=\langle\hat{a}^+_{\boldsymbol{p}}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}\rangle$$

$$=\frac{1}{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2}\langle(\hat{b}^+_{\boldsymbol{p}}-\beta_{\boldsymbol{p}}\hat{b}_{-\boldsymbol{p}})(\hat{b}_{\boldsymbol{p}}-\beta_{\boldsymbol{p}}\hat{b}^+_{-\boldsymbol{p}})\rangle$$

$$=\frac{1+\beta_{\boldsymbol{p}}^2}{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2}\langle\tilde{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle+\frac{\beta_{\boldsymbol{p}}^2}{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2} \tag{11}$$

可见它不是玻色分布。系统处于受微扰的基态($T=0\text{K}$)时,实际粒子的分布 $\langle\hat{n}^0_{\boldsymbol{p}}\rangle$ 就是粒子数算符对基态 $|\psi_0\rangle$ 的期待值 $\langle\hat{n}^0_{\boldsymbol{p}}\rangle=\langle\psi_0|\hat{n}_{\boldsymbol{p}}|\psi_0\rangle$,由式(11)并注意到 $T=0\text{K}$ 时,$\langle\tilde{n}_{\boldsymbol{p}}\rangle=0$,即得

$$\langle\hat{n}^0_{\boldsymbol{p}}\rangle=\frac{\beta_{\boldsymbol{p}}^2}{1-\beta_{\boldsymbol{p}}^2}$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\frac{\frac{p^2}{2m}+\frac{Nv_0}{V}}{\left[\frac{p^2}{2m}\left(\frac{p^2}{2m}+\frac{2Nv_0}{V}\right)\right]^{1/2}}-1\right\} \tag{12}$$

在系统的受微扰的基态中,$\boldsymbol{p}\neq 0$ 单粒子态上实际粒子总数为

$$\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\langle\hat{n}^0_{\boldsymbol{p}}\rangle=\frac{V}{8\pi^3\hbar^3}\int_0^\infty\langle\hat{n}^0_{\boldsymbol{p}}\rangle 4\pi p^2\mathrm{d}p$$

$$=N\frac{8}{3\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2} \tag{13}$$

零动量单粒子态上的粒子数则为

$$\langle n_0\rangle=N-\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0}\langle n^0_{\boldsymbol{p}}\rangle$$

$$=N\left[1-\frac{8}{3\sqrt{\pi}}(na^3)^{1/2}\right] \tag{14}$$

可见,在 $T=0\mathrm{K}$ 时,仍有一部分处于 $\boldsymbol{p}\neq0$ 的单粒子态上,但因 $na^3\ll1$,故所有处于 $\boldsymbol{p}\neq0$ 的单粒子态上的粒子数是很少的。

博戈留波夫模型及其哈密顿量 Bogoliubov model and its Hamiltonian 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

博戈留波夫变换 Bogoliubov transformation 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

简并性近理想玻色气体(排斥势)的基态能量与压强 ground state energy and pressure of degeneracy near ideal Bose gas (repulsive potential) 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

简并性近理想玻色气体(排斥势)准粒子能谱 quasiparticle energy spectrum of degeneracy ideal Bose gas (repulsive potential) 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

简并性近理想玻色气体(排斥势)准粒子平衡分布 quasiparticle equilibrium distribution of degeneracy near ideal Bose gas (repulsive potential) 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

简并性近理想玻色气体(排斥势)实际粒子的平衡分布 real particle equilibrium distribution of degeneracy near ideal Bose gas (repulsive potential) 见“简并性近理想玻色气体(排斥势)的博戈留波夫理论”。

超流费米液体 superfluidity Fermi liquid 吸引性相互作用的费米流体能产生动量凝聚,元激发能谱出现能隙,导致费米液体超流性。采用一种弱吸引力的简并性近理想费米气体模型,以说明超导体中发生凝聚相变的基本机制。

(1)模型的哈密顿量。设动能处于费米面两侧 $\Delta\varepsilon$ 的薄层内的费米子之间存在一弱吸引力,且只有具有等量但方向相反的动量和自旋的一对费米子才相互吸引,形成库珀对——一种特殊形式的束缚态。设这种相互作用可表示为

$$V_{p'p}\equiv\langle \boldsymbol{p}'\uparrow,-\boldsymbol{p}'\downarrow|\hat{V}|\boldsymbol{p}\uparrow,-\boldsymbol{p}\downarrow\rangle=\begin{cases}-V_0(V_0\text{:正常数}), & \left|\mu-\dfrac{p^2}{2m}\right|<\Delta\varepsilon,\ \left|\mu-\dfrac{p'^2}{2m}\right|<\Delta\varepsilon\\ 0 & \text{其他情形}\end{cases}\tag{1}$$

其中 $V_{p'p}$ 为算符 $\hat{V}$ 的矩阵元,表示消灭动量为 $\boldsymbol{p}$ 和 $-\boldsymbol{p}$、自旋相反的一对费米子,产生动量为 $\boldsymbol{p}'$ 和 $-\boldsymbol{p}'$、自旋相反的一对费米子。↑,↓ 分别代表自旋 $\sigma=+1,-1$。系统的哈密顿量为

$$\hat{H}=\sum_{p,\sigma}\frac{p^2}{2m}\hat{a}^+_{p\sigma}\hat{a}_{p\sigma}+\sum_{p,p'}V_{p'p}\hat{a}^+_{p'\uparrow}\hat{a}^+_{-p'\downarrow}\hat{a}_{-p\downarrow}\hat{a}_{p\uparrow}\tag{2}$$

式中 $\hat{a}^+_{p\sigma}$, $\hat{a}_{p\sigma}$ 是无相互作用系统的单粒子态 $(\boldsymbol{p},\sigma)$ 的产生和消灭算符,满足反对易关系。采用平均场近似方法处理相互作用较方便。让 $\hat{H}'=\hat{H}-\mu\hat{N}$, $\hat{N}$ 是粒子数算符:

$$\hat{N}=\sum_{p,\sigma}\hat{a}^+_{p\sigma}\hat{a}_{p\sigma}\tag{3}$$

令 $\varepsilon_p\equiv\dfrac{p^2}{2m}-\mu$,即能量应从费米面算起,并令

$$X_p\equiv\langle\hat{a}_{-p\downarrow}\hat{a}_{p\uparrow}\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{a}_{-p\downarrow}\hat{a}_{p\uparrow})\quad(\hat{\rho}\text{为巨正则系综密度矩阵})\tag{4}$$

$$\Delta_p\equiv\sum_{p'}V_{pp'}X_{p'}\ (\Delta^+_p=\sum_{p'}V_{p'p}X^+_{p'})\tag{5}$$

Δ_p 称为能隙函数,可作为凝聚相的序参数。可得

$$\begin{aligned}\hat{H}'&=\sum_p\hat{H}'_p-\sum_p\Delta^+_pX_p+\sum_p\varepsilon_p,\\ \hat{H}'_p&\equiv\varepsilon_p\hat{a}^+_{p\uparrow}\hat{a}_{p\uparrow}-\varepsilon_p\hat{a}_{-p\downarrow}\hat{a}^+_{-p\downarrow}\\ &\quad+\Delta^+_p\hat{a}_{-p\downarrow}\hat{a}_{p\uparrow}+\Delta_p\hat{a}^+_{p\uparrow}\hat{a}^+_{-p\downarrow}\\ &=\hat{\boldsymbol{A}}^+_p\varepsilon_p\hat{\boldsymbol{A}}_p\end{aligned}\tag{6}$$

$\hat{H}'$ 的式中第二项为 C 数,$\hat{H}'_p$ 的式中 $\hat{\boldsymbol{A}}_p$, ε_p 和 $\hat{\boldsymbol{A}}^+_p$ 均为矩阵:

$$\hat{A}_p = \begin{pmatrix} \hat{a}_{p\uparrow} \\ \hat{a}^+_{-p\downarrow} \end{pmatrix}, \hat{A}^+_p = (\hat{a}^+_{p\uparrow}, \hat{a}_{-p\downarrow}),$$

$$\varepsilon_p = \begin{pmatrix} \varepsilon_p & \Delta_p \\ \Delta^+_p & -\varepsilon_p \end{pmatrix} \quad (7)$$

（2）博戈留波夫（Bogoliubov）-瓦拉廷（Valatin）变换（$B-V$ 变换）。为使式（6）中 $\hat{H}'_p$式对角化，作一么正变换——$B-V$ 变换，为此，引入一（2×2）矩阵 U_p和（2×1）矩阵 Γ_p，U_p作用在 Γ_p上变为$\hat{A}_p$。即

$$U_p = \begin{pmatrix} u^*_p & v_p \\ -v^*_p & u_p \end{pmatrix}, \hat{\Gamma}_p = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_{p0} \\ \hat{\gamma}^+_{p1} \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$\hat{A}_p = U_p \hat{\Gamma}_p \quad (9)$$

U_p 的矩阵元是 p 的复变函数，因每一动量 p 有两个自旋态，需引入两个产生和两个消灭的准粒子算符：$\hat{\gamma}^+_{p0'}\hat{\gamma}^+_{p1}$和$\hat{\gamma}_{p0'}\hat{\gamma}_{p1}$。这种准粒子称为博戈子（Bogolon）。若让关系$|u_p|^2 + |v_p|^2 = 1$ 成立，则$\hat{\gamma}_{p\alpha}$和$\hat{\gamma}^+_{p\alpha}$（$\alpha = 0, 1$）遵从反对易关系，且有 $U^+_p U_p = U_p U^+_p = 1$。算符$\hat{\gamma}_{p0}$是$\hat{a}_{p\uparrow}$和$\hat{a}^+_{-p\downarrow}$的线性组合，它使系统的动量减少 p，自旋减少 $\hbar$，而$\hat{\gamma}^+_{p1}$则使系统的动量增加 p，自旋增加 $\hbar$。引入一 2×2 对角矩阵 $E_{p'}$使

$$U^+_p \varepsilon_p U_p = E_p, E_p = \begin{pmatrix} E_p & 0 \\ 0 & -E_p \end{pmatrix} \quad (10)$$

E_p 包含博戈子激发能量，取式（10）第 1 式平方，即得

$$E_p = (\varepsilon^2_p + |\Delta_p|^2)^{1/2}$$
$$= \left[\left(\frac{p^2}{2m} - \mu \right)^2 + |\Delta_p|^2 \right]^{1/2} \quad (11)$$

与自旋变量 α 无关。$B-V$ 变换将存在相互作用的费米气体系统转换为准粒子（博戈子）的理想费米气体系统。式（6）中的 $\hat{H}'$ 变为下述准粒子系统哈密顿表式

$$\hat{H}' = \sum_p \hat{A}^+_p \varepsilon_p \hat{A}_p + \sum_p (\varepsilon_p - \Delta^+_p X_p)$$
$$= E_0 + \sum_{p,\alpha} E_p \hat{n}_{p\alpha},$$
$$E_0 = -\sum_p (E_p - \varepsilon_p) - \sum_p \Delta^+_p X_p \quad (12)$$

E_0 是没有准粒子时的基态能量，准粒子占有数算符 $\hat{n}_{p\alpha}$，为

$$\hat{n}_{p\alpha} = \hat{\gamma}^+_{p\alpha} \hat{\gamma}_{p\alpha} \quad (13)$$

超流费米气体的能谱式（11）为一抛物线，存在着能隙 Δ_p，这与正常费米液体的能谱根本不同。根据朗道超流判据，弱吸引相互作用费米气体具有超流性，基态可视为所有粒子均形成库珀对。（其实只有靠近费米面的库珀对才有物理意义）破坏一个库珀对得耗费有限的能量，因此能谱中存在能隙。每破坏一个库珀对产生两个博戈子，故 $2\Delta_p$是库珀对的束缚能。

（3）能隙方程。利用关系式$\langle \hat{A}_p \hat{A}^+_p \rangle = U_p \langle \hat{\Gamma}_p \hat{\Gamma}^+_p \rangle U^+_p$（由式（9））得

$$1 - 2\langle \hat{n}_p \rangle = \frac{\varepsilon_p}{E_p} \tanh \frac{E_p}{2k_B T},$$

$$X_p = -\frac{1}{2} \frac{\Delta_p}{E_p} \tanh \frac{E_p}{2k_B T} \quad (14)$$

$$\Delta_{p'} = \sum_p V_{p'p} X_p$$
$$= \frac{V_0}{2} \sum_p{}' \frac{\Delta_p}{\sqrt{\varepsilon^2_p + \Delta^2_p}} \tanh \frac{\sqrt{\varepsilon^2_p + \Delta^2_p}}{2k_B T} \quad (15)$$

式（15）中 $\sum'$ 指在对 p 求和时，限于费米面两则 $\Delta\varepsilon$ 的能量范围。可见，Δ_p与 p 无关，但与 T 有关，可用$\Delta(T)$代替 Δ_p，将式（15）求和代以积分，并取近似 $p^2 \mathrm{d}p \approx p^2_F \left(\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\varepsilon} \right)_{p_F} \mathrm{d}\varepsilon$，费米面处的态密度为 $N(0) = \frac{2 \times 4\pi p^2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}\varepsilon} \Big|_{p=p_F} V = \frac{mV}{\pi^2 \hbar^3} p_F$（$p_F$：费米动量）。于是得到著名的、表示能隙与温度间关系的 BCS（Bardeen-Cooper-Schrieffer）能隙方程

$$1 = \frac{V_0}{2}\frac{V}{\pi^2\hbar^3}$$

$$\cdot\int p^2 \mathrm{d}p \frac{\tanh(\sqrt{\varepsilon_p^2+\Delta^2(T)}/2k_BT)}{\sqrt{\varepsilon_p^2+\Delta^2(T)}}$$

$$= V_0 N(0)$$

$$\times\int_0^{\Delta\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon\frac{\tanh(\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2(T)}/2k_BT}{\sqrt{\varepsilon^2+\Delta^2(T)}} \quad (16)$$

①当 $T=T_c$(临界温度)时,$\Delta(T_c)=0$,退化为正常相能谱。则有

$$1 = N(0)V_0\int_0^{\Delta\varepsilon}\frac{\tanh\frac{\beta\varepsilon}{2}}{\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon$$

$$= N(0)V_0\ln(1.13\beta_c\Delta\varepsilon)$$

或

$$k_BT_c=\beta_c^{-1}=1.13\Delta\varepsilon e^{-1/N(0)V_0} \quad (17)$$

表明 T_c 与相互作用强度 V_0 呈指数关系,V_0 或 $N(0)$越大,T_c 就越高。V_0 是本性奇异点,故不能用通常的方法计算。

②当 $T=0$ 时,$\Delta(T)=\Delta(0)$,$\tanh\infty=1$,式(16)变为 $1=N(0)V_0\sinh^{-1}\frac{\Delta\varepsilon}{\Delta(0)}$,在 $V_0N(0)\ll 1$ 即弱耦合系统的条件下,可得到如下结果

$$\Delta(0)\approx 2\Delta\varepsilon e^{-1/N(0)V_0},$$

$$\frac{\Delta(0)}{kT_c}=\frac{2}{1.13}=1.74 \quad (18)$$

第 2 式对任何弱耦合超导体均适合,已为实验证实。

③当 $T\to 0$ 及 $T\to T_c-0$ 时,由式(16)求得 $\Delta(T)$的两个渐近式

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)}=\left[1-\sqrt{\frac{2\pi k_BT}{\Delta(0)}}e^{-\Delta(0)/k_BT}\right] \quad (T\to 0),$$

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)}=1.74\left(1-\frac{T}{T_c}\right)^{1/2} \quad (T\to T_c-0) \quad (19)$$

对于中间温区,用数值计算法由式(16)求出 $\Delta(T)$与 T 的关系示于图 1 上。式(19)中第 2 式表明,$\Delta(T)$作为研究超导相-正常相的相变的序参量,其临界指数为 $\frac{1}{2}$,这正是平均场理论的普遍结论。

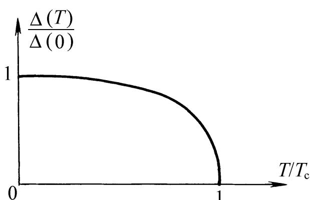


图 1

(4)临界点附近的比热容。在温度足够低、准粒子不很多的条件下,系统的熵可表示为

$$S=-k_B\sum_{p,\alpha}[\langle\tilde{n}_{p\alpha}\rangle\ln\langle\tilde{n}_{p\alpha}\rangle + (1-\langle\tilde{n}_{p\alpha}\rangle)\ln(1-\langle\tilde{n}_{p\alpha}\rangle)]$$

$$=-2k_B\sum_p[\langle\tilde{n}_p\rangle\ln\langle\tilde{n}_p\rangle + (1-\langle\tilde{n}_p\rangle)\ln(1-\langle\tilde{n}_p\rangle)] \quad (20)$$

利用式(20),并注意到准粒子占有数平均值 $\langle\tilde{n}_p\rangle=\langle\tilde{n}_p\rangle(\beta,E_p(\beta))$,求出比热容为

$$C_{VS}=T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_V$$

$$=-2k_B\beta^2\sum_p\frac{\partial\langle\tilde{n}_p\rangle}{\partial\beta}E_p$$

$$=-2k_B\beta\sum_p\frac{\partial\langle\tilde{n}_p\rangle}{\partial E_p}\left(E_p^2+\frac{\beta}{2}\frac{\partial\Delta^2}{\partial\beta}\right) \quad (21)$$

式(21)的最后一个等式中第 1 项在 $T=T_c$ 时是连续的,但由于 $\frac{\partial\Delta^2}{\partial\beta}$ 在 $T\to T_c-0$ 时为有限值,$T>T_c$ 时等于零,故第 2 项不连续。在 T_c 附近,可以 ε_p 代替 E_p,用理想气体分布 $\langle n_p\rangle$ 代替 $\langle\tilde{n}_p\rangle$,求得 C_{VS}(超导相)、C_{Vn}(正常相)以及 C_V 在 $T=T_c$ 处跃变 ΔC_V 的表示式

$$C_{VS}=-2k_B\beta\sum_p\frac{\partial\langle n_p\rangle}{\partial\varepsilon_p}\left[\varepsilon_p^2+\frac{\beta_c}{2}\left(\frac{\partial\Delta^2}{\partial\beta}\right)_{\beta=\beta_c}\right] \quad (T\to T_c-0),$$

$$C_{Vn}=-2k_B\beta\sum_p\frac{\partial\langle n_p\rangle}{\partial\varepsilon_p}\varepsilon_p^2 \quad (T\to T_c+0) \quad (22)$$

$$\Delta C_V=C_{VS}-C_{Vn}$$

$$=-k_B\beta_c^2\sum_p\left(\frac{\partial\Delta^2}{\partial\beta}\right)_{T=T_c}\frac{\partial\langle n_p\rangle}{\partial\varepsilon_p}$$

$$=\left(\frac{\partial\Delta^2}{\partial T}\right)_{T=T_c}\int N(\varepsilon)\frac{\partial\langle n\rangle(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\mathrm{d}\varepsilon$$

$$\approx-\left(\frac{\partial\Delta^2}{\partial T}\right)_{T=T_c}N(0)>0\quad(T=T_c)\tag{23}$$

式(23)的最后一个等式是利用了关系式 $\frac{\partial\langle n\rangle(\varepsilon)}{\partial\varepsilon}\approx-\delta(\varepsilon)$(对于足够低的温度)得到的。因 $-\left(\frac{\partial\Delta^2}{\partial T}\right)_{T=T_c}>0$,故 $\Delta C_V>0$。将式(19)代入式(23)可算出 ΔC_V 的值。C_V-T 示意图示于图2上,当 $T>T_c$ 时,弱吸引相互作用费米气体的 C_V 与理想费米气体的相同,与 T 呈线性关系。当 $T=T_c$ 时,转变到超流相,C_V 出现一个跃变,且改变了对 T 的依赖关系。向超流相(或凝聚相)的转变是一连续相变,相变点是一λ点。

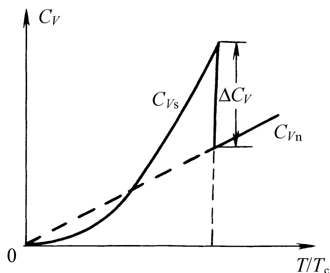


图2

简并性近理想费米气体(吸引势)的哈密顿量 Hamiltonian of degeneracy near ideal Fermi gas (attractive potential) 见“超流费米液体”。

库珀对 Cooper pair 见“超流费米液体”。

博戈留波夫-瓦拉廷变换 Bogoliubov-Valatin transformation 见“超流费米液体”。

博戈子 bogolon 见“超流费米液体”。

巴丁-库珀-施里弗能隙方程 Bardeen-Cooper-Schrieffer equation of energy gap 见“超流费米液体”。

简并性近理想费米气体(吸引势)的能隙函数及其在绝对零度时的表示式 energy gap function and its expression at absolute zero for degeneracy near ideal Fermi gas (attractive potential) 见“超流费米液体”。

弱耦合系统的临界温度与零温能隙的关系 relationship between critical temperature and zero temperature gap for weakly coupled system 见“超流费米液体”。

简并性近理想费米气体(吸引势)当 $T\to0$ 和 $T\to T_c-0$ 时能隙函数的渐近式 asymptotic form of energy gap function for degeneracy near ideal Fermi gas (attractive potential) as $T\to0$ and $T\to T_c-0$ 见“超流费米液体”。

简并性近理想费米气体(吸引势)在临界点附近的比热容 specific heat capacity near critical point for degeneracy near ideal Fermi gas (attractive potential) 见“超流费米液体”。

Quantum Mechanics
量子力学

量子力学 quantum mechanics 量子力学诞生于20世纪20年代，是在深入研究量子效应的基础上建立起来的。量子力学研究微观客体的运动规律。实验发现微观客体有波粒二象性：以波动方式传播运动；以粒子方式和物质相互作用。二象性并不同时出现于同一实验条件下，而是互补的。这种和粒子相联系的波叫德布罗意（L. de Broglie）波，用波函数 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$ 表示，其物理意义是描述粒子 t 时落在 $\boldsymbol{x}$ 处的概率密度幅。微观客体以波动方式传播，严格的经典力学中的轨道概念失去意义。量子力学的状态由波函数 ψ 描写，因为它可给出位置测量的统计分布。在量子力学中位置和动量的不确定度满足不确定关系：$\Delta x \Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}$，$\hbar$ 为除以 2π 的普朗克（Plank）常量。对于有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 的自由粒子，其相应的德布罗意波是复数形式的单色平面波；联系波粒两方面性质的德布罗意关系：$\boldsymbol{p}=\hbar \boldsymbol{k}$，$E=\hbar\omega$。波场要形成稳定的驻波，对频率是有所挑选的，这使得能量取离散值（能级）。在外界的扰动下，体系会发生量子跃迁，从一个能级的态跃迁到另一能级的态。由于不确定关系，动能和势能不能同时测准，不能把能量 E 划分为动能和势能各占多少；粒子遇到比其能量 E 还要高的势垒时，还是有一定的概率穿过势垒，这是波动效应。由于求平均值，力学量 A 过渡到算符 $\hat{A}$。在 $\hat{A}$ 的本征态 ψ_n，$\hat{A}\psi_n = a_n\psi_n$，测准 A 取本征值 a_n。对于 $\psi=\sum_n C_n\psi_n$，测量 A 时，发生波函数的编缩，$\psi \to C_n\psi_n$，测到 a_n 的概率为 $|C_n|^2$。

非相对论性的量子力学有如下的基本假设：

（1）微观系统的状态由波函数完全描写；

（2）量子态满足叠加原理：若 ψ_i，$i=1,2,3,\cdots,f$，是一定条件下可能的量子态，则 $\psi=\sum_i C_i\psi_i$ 也是同样条件下可能的量子态；

（3）系统的量子态的演化规律由薛定谔（Schrodinger）方程描写；

（4）力学量算符由具有完备本征函数系的线性厄米（自伴）算符表示，在 ψ 态测力学量 A 的期望值为 $\langle A\rangle=\int \psi^* \hat{A}\psi d^3x$；

（5）体系的广义坐标和广义动量相应的算符 $\hat{q}_i$，$\hat{p}_i$，$i=1,2,\cdots,f$，满足量子条件：$[\hat{q}_i, \hat{q}_j]=0$；$[\hat{p}_i, \hat{p}_j]=0$；$[\hat{q}_j, \hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk}$

其中方括号代表对易关系：$[\hat{A}, \hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$。有了量子条件，由 q_i，p_i 构成的经典力学量，就可过渡为算符，实现一次量子化。例如 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$，则 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{x}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$；

（6）对全同粒子系，波函数对任何二粒子的交换是对称（玻色子系）或反对称（费米子系）的。

在量子力学的发展初期，曾因表达方式的不同而被称作波动力学或矩阵力学，以后两种发展道路殊途同归。量子力学的建立和发展，拓展到相对论量子力学、量子电动力学、量子场论等，对微观物理和相关学科、交叉学科的进展研究和对科学的发展起到了历史性的突进作用。

一、量子力学的实验基础
Basic Experiments on Quantum Mechanics

黑体辐射 black body radiation 黑体能全部吸收辐射到的电磁波而完全不反射。将内壁粗糙而涂黑的密闭空腔开一小孔就接近一个黑体（见图1）。由于小孔面积比空腔内壁面积小得多，任何一种辐射进入小孔后，难以再从小孔复出；从小孔射入空腔的电磁波经腔壁多次反射后几乎全部被吸收。

当腔壁被均匀加热，腔壁带电粒子的振动加

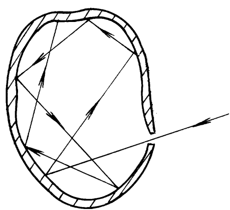


图 1

剧而产生的热辐射使腔中激发电磁场，并有部分能量从小孔中向外辐射。当达到平衡温度T，腔内每单位体积内频率 ν 到($\nu+d\nu$)的电磁波能量密度不再变化。这时，单位时间内腔壁的热辐射能量等于空腔中电磁场被腔壁吸收的能量与从小孔中辐射出的能量之和。从小孔中辐射的能量和温度 T 有关。

在一定温度 T 下，空腔内部存在各种波长"λ"(连续)的电磁波，它们向各个方向传播。19 世纪末叶，实验上对黑体辐射的能谱密度 $u(\lambda)$的测量结果如图 2 所示。

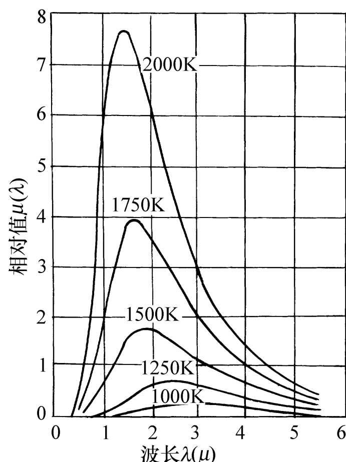


图 2 几种温度下的黑体辐射谱

根据经典电磁物理和经典统计物理，瑞利–金斯(Rayleigh-Jeans)得到 $u(\lambda)$的分布公式，虽然可以解释图 2 中长波长一侧的曲线形状，但完全不能说明短波长一侧的曲线形状，产生了所谓"紫外光的灾难"。为了解释整条实验曲线的形状，普朗克(Planck)假设辐射频率为 ν 的电磁波的腔壁上带电振子的能量

$$E_n = nh\nu, n = 0、1、2、\cdots \tag{1}$$

振子的能量是一份份地辐射(与电磁场交换)，频率为 ν 的电磁波的能量也是一份份的。在此基础上得到的 $u(\lambda)$公式和实验曲线符合得很好。详见图 3。式(1)表明能量是离散的，

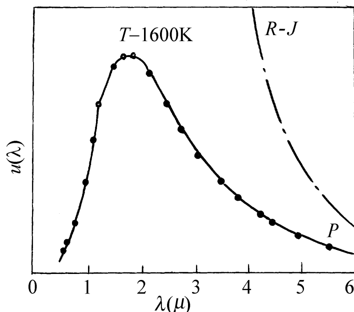


图 3 1600K 的热辐射谱

P——普朗克公式；

$R-J$——瑞利–金斯公式

这和经典物理关于能量连续变化的概念大相径庭。其中 h 称为普朗克常量，其数值 $h=6.625\times10^{-34}$J·s。一份最小能量 $h\nu$ 称为量子。以后发现电磁场的这份能量 $h\nu$ 是集中的，是一个粒子，叫做光子。常记 $h\nu=\hbar\omega$，ω 是角频率，$\hbar=h/2\pi$。

量子 quantum 频率为 ν 的单色光至少有一份最小能量 $h\nu$，被称为量子，见"黑体辐射"。将场量子化，即将场量当作算符并满足一定的算符代数规则，则场的能量、动量、质量等都成为一份份的，即出现量子，这时的场相当于全同多粒子系统。

光电效应 photoelectric effect 光射到金属上，有电子从金属表面逸出，这种效应称为光电效应。逸出的电子称为光电子。用强度 I 和角频率 ω 描述入射单色光，用初动能 T 和每秒逸出数 n 描述光电子，光电效应的性质就反映在这两对参量之间的关系上，由实验测量得到：

(1) T 与 ω 成正比而与 I 无关；

(2)当 $\omega<\omega_m$(红限)，即使 I 很大也不发生

光电效应，即 $n=0$；

(3)从光照射金属到光电子逸出的弛豫时间

$$\Delta t < 10^{-9}\text{s}$$

电子从金属中逸出要做逸出功 Φ，剩下的能量成为初动能 T，所以光电子应从光得到能量 $E=T+\Phi$。若按经典物理将光当作电磁波，则光的能量不可能被加速度为零的自由电子所吸收。光波中的周期电场，使金属中的束缚电子作受迫振动。当光的频率和束缚电子的固有频率相等时，产生共振，共振吸收的功率和光的强度成正比而和 ω 无关。并且仅当束缚电子吸收光的能量大于金属的逸出功时才能逸出，也就是需要积累能量的时间，不可能瞬时就发生光电效应。总之，光的波动理论不能解释光电效应的实验性质。

1905 年，爱因斯坦（Einstein）受黑体辐射时电磁场的能量是一份份辐射的启迪，假设光的能量被吸收也是一份份的，即有

$$\hbar\omega = T + \Phi$$

这样，光电效应的性质(1)是一目了然的；若 Φ 等于 $\hbar\omega_m$，则 $\omega < \omega_m$ 不可能有光电子逸出；光电效应的瞬时性，弛豫时间 $\Delta t \to 0$，表明一份 $\hbar\omega$ 是集中的，以致吸收能量发生在瞬间。光电效应存在红限的事实，也表明一个电子同时吸收二份 $\hbar\omega$ 和以上能量的情形，实际上并不发生。

光电子 photoelectron 光电效应中逸出的电子叫做光电子。X 射线的光电子能谱可用以表征电子从中逸出物质的性质。$\hbar\omega=-E_n+\Phi+T_n$，其中 E_n 为物质原子的能量，束缚态的能级 E_n 为负值。由光电子能谱 T_n 可知物质原子的能级 E_n。见“光电效应”。

光子 photon 黑体辐射和光电效应表明辐射和吸收角频率为 ω 的单色电磁波的能量都是一份份 $\hbar\omega$ 地发生的。光电效应的瞬时性表明一份 $\hbar\omega$ 能量是集中的，相当于一个粒子——光子。

利用质能关系 $E=mc^2$，c 为光速，则光子的能量

$$E = \hbar\omega = mc^2$$

则光子的动量

$$p = mc = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}\hbar = k\hbar$$

定义波矢量 $\boldsymbol{k}$ 的方向和动量 $\boldsymbol{p}$ 相同，都沿单色平面波的波前的法向，则对光子有

$$\begin{cases} E = \hbar\omega \\ \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k} \end{cases}$$

这称为爱因斯坦方程（关系）。

光子概念表明光和物质相互作用时呈粒子性；光又以电磁波形式运动，称波粒二象性。爱因斯坦方程定量的联系了单色光的粒子性和波动性的二个侧面，该方程被德布罗意推广为适用于其他粒子，所以又称为爱因斯坦-德布罗意关系。

爱因斯坦方程 Einstein equation 光有波粒二象性，与有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 的光子相联系的单色光的波矢为 $\boldsymbol{k}$，频率为 ω，爱因斯坦方程揭示了波粒二方面物理量之间的联系：

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k},\ E = \hbar\omega$$

反映了波粒二象性对立双方存在着统一性。见“光子”。有了爱因斯坦方程，原可由光的波动性解释的实验事实，也可由光子流得到说明，例如光压。

康普顿效应 Compton effect 康普顿效应是指 X 射线的反常散射现象，即散射光中存在波长比入射光增加的成分，见图 1。而且波长增加量 $\Delta\lambda$ 与引起散射的靶物质无关而与散射角 θ 有关：

$$\Delta\lambda = 2\frac{h}{\mu c}\sin^2\frac{\theta}{2} = 2\Lambda\sin^2\frac{\theta}{2}$$

式中常量 $\Lambda=\dfrac{h}{\mu c}=2.426\times10^{-12}\text{m}$ 被称为康普顿波长，其中 h 为普朗克常数，c 为光速，μ 为电子的静质量。

根据光的波动理论，被靶物质散射的 X 射线，其波长和入射光相同。入射光中的电场以角频率 ω 作周期振动，它迫使自由电子也以角频 ω 作振动，因此辐射出角频也为 ω 的散射光。束缚电子与入射光共振时，发射光的频率也和入射光相同。所以波动光学不能解释康普顿效应。

靶物质中，有些电子离原子核近，紧密地束缚在原子上；也有些电子则束缚得较为松弛。对于受动量大的X 射线光子的冲击，束缚得松

弛的电子可以近似作静止的自由电子对待，正是这些电子造成 X 射线反常散射。设动量为 $\hbar \boldsymbol{k}_0$ 的光子被静止的电子吸收，后者又立即发射动量为 $\hbar \boldsymbol{k}$ 的光子，而自己以动量 $\boldsymbol{p}$ 反冲，如图 2。

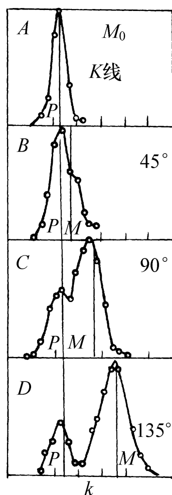


图 1

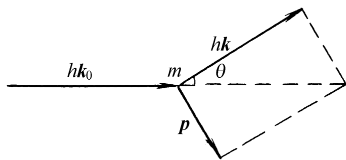


图 2

根据动量和能量守恒定律，有方程

$$\begin{cases} \hbar \boldsymbol{k}_0 = \hbar \boldsymbol{k} + \boldsymbol{p} \\ \hbar \omega_0 = \hbar \omega + \dfrac{1}{2\mu} p^2 \end{cases} \quad (1)$$

由于反冲电子带走能量，散射光子的能量 $\hbar\omega$ 小于入射光子的能量 $\hbar\omega_0$，即散射光子的波长增大，$\lambda_0 \rightarrow \lambda = \lambda_0 + \Delta\lambda$。如果散射角 θ 增大，则电子反冲动量增大，带走的动能增大，因此 $\Delta\lambda$ 增大。

考虑到 $\Delta\lambda$ 是小量，近似有 $k_0 k^{-1} \approx k k_0^{-1} \approx 1$，从方程(1)的 2 个守恒方程可得：

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = 2\frac{h}{\mu c}\sin^2\theta/2$$

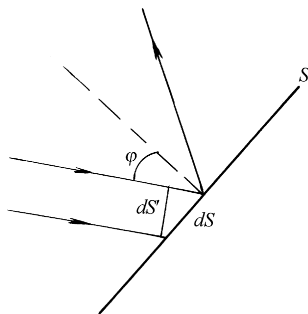
并且 $\Delta\lambda$ 的理论计算值和实验测量值相一致。这说明爱因斯坦关系以及动量和能量守恒定律在微观世界都是正确的。

康普顿波长 Compton wavelength 康普顿波长 $\Lambda = \dfrac{h}{\mu c} = 2.426 \times 10^{-12}$ 米，见“康普顿效应”。这个特征长度反映电子可以影响光子的程度。在相对论性量子力学中，如果把电子定域到 $\Delta x \leqslant \dfrac{1}{8\pi}\ \dfrac{h}{\mu c}$，则由于不确定关系，$\Delta p \geqslant \dfrac{\hbar}{2\Delta x} > 2\mu c$，粒子能量可大于 $2\mu c^2$，就有可能出现“粒子对”产生现象。

光压 light pressure 光子有动量。光照在物体表面上，由于光子和表面的碰撞有动量交换，因而产生光压。光压的大小和光的强度、照射角度以及表面对光的反射性质有关。

设频率为 ν，强度(能流密度)为 I 的单色光，以入射角 φ(入射光与表面法线的夹角)投射到表面 S 上，如图。单位时间流过 $\mathrm{d}S'$ 面积的光子数为 $I\mathrm{d}S'/h\nu$，相应的动量为

$$I\mathrm{d}S'(h\nu)^{-1} \cdot \frac{h\nu}{c} = \frac{I\mathrm{d}S'}{c}$$



设表面 S 为完全反射面，则光子经 $\mathrm{d}S$ 反射后单位时间垂直表面方向的动量改变为 $\dfrac{2I}{c}\mathrm{d}S' \cdot \cos\varphi$

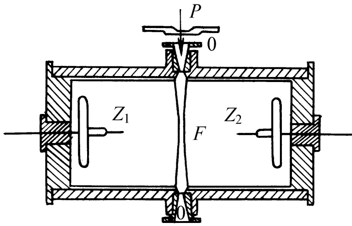
故光压(单位面积的动量改变)为

$$p = \frac{2I}{c}\cos\varphi\frac{\mathrm{d}S'}{\mathrm{d}S} = \frac{2I}{c}\cos^2\varphi$$

注意 $\mathrm{d}S' = \mathrm{d}S\cos\varphi$。如果表面 S 为黑面，则光

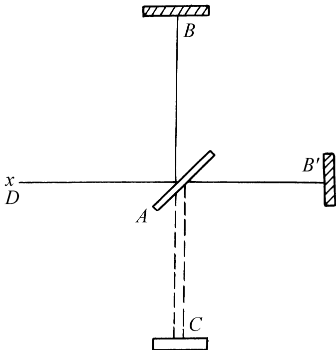
压为　$p=\frac{I}{c}\cos^2\varphi$。

博特实验　W. Bothe experiment　这是检验光量子的一份 ħω 能量是集中的还是分散的实验。实验装置如图，薄铁片或铜片 F 挂在两个计数器 Z_1 和 Z_2 之间。波长适当短的 X 射线从窗口 P 射入，照在 F 上激发 F 的原子，使它们再发射次级的 X 射线。当次级 X 射线照射在计数器上时，就发生电脉冲。实验表明 Z_1 和 Z_2 完全互不关联，相互独立地计数。



实验使得 F 上发射的次级 X 射线很弱，每次只发射一份 ħω 的能量。如果 ħω 均匀分布在由点光源发射的球面波波前上，则两个计数器同时计数；如果 ħω 是集中的，则计数器不相关计数。实验表明每份 ħω 是集中的。

杨诺希实验　L. Janossy experiment　匈牙利物理学家杨诺希在 20 世纪 50 年代，用迈克尔逊（A. A. Michelson）干涉仪做了单光子实验。如图，其中 D 是光源系统，A 是半涂银镜，B 和 B' 是涂银反射镜（相距 18 米），C 是感光片，用来记录干涉条纹（D 中狭缝的像）。



计算和调节入射的光强，使得经 A 及 B 或 B' 的吸收后，每次落到 C 上只有一份 ħω 能量。光源一次次发出弱光流，开始阶段 C 上接收到星星点点，是很不规则的，这表明每份 ħω 都是集中的，且一份 ħω 落在某处是偶然事件；当光源 D 发射次数多了，感光点累积成为有规则的干涉条纹。按波动光学，强度大的地方到达的光子数多；强度为零处，无光子到达。这表明电磁波是光子的概率幅波。

B 和 B' 虽相距达 18m，但实验事实表明 B' 的存在仍影响到经 B 反射一路光子的运动，这表明量子力学有整体性，光子的运动受到整个环境的影响。

弗兰克–赫兹实验　Franck-Hertz experiment　由氢光谱的实验规律可知，每条谱线的角频率 ω 都是二个光谱项值之差：$\omega = T(n) - T(m)$，光谱项 $T(n)=2\pi R_H c/n^2$，$n=1,2,3,\cdots\cdots$，其中里德伯（J. R. Rydberg）常量 $R_H=109677.6\text{cm}^{-1}$，$c$ 为光速。注意到 ħω 是一个光子的能量。由于能量守恒，氢原子释放一个光子 ħω 后将从高能态进入低能态；又由于氢原子束缚态的能量是负的，则有 $\hbar\omega = (-T(m)\hbar)-(-T(n)\hbar)=E_m - E_n$

即得到氢原子的能量取离散值

$$E_n = -T(n)\hbar = -2\pi R_H c\hbar/n^2$$

1914 年，弗兰克–赫兹实验是光谱实验以外证实原子能量离散取值的第一个实验。实验使用充汞的三极管，如图 1 所示，灯丝 F 发射的热电子受到加在栅极 G 和 F 间的电压加速，在加速过程中与汞蒸气原子相碰撞。G 靠近板极 P，而板极电势比栅极低 0.5V，使得电子由 G 到 P 基本上不再遇到碰撞，而由于非弹性碰撞而损失了能量的电子将被 G 和 P 之间的反向电压筛去。实际上，G 和 P 是两个同轴圆筒，F 则在轴上。实验测量板极电流与栅极电



图 1

势之间的关系。结果得到如图 2 的曲线。

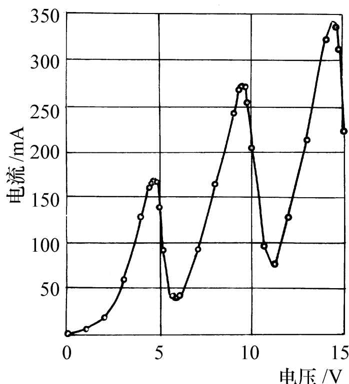


图 2

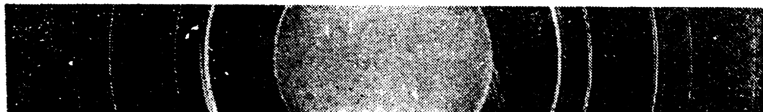
实验结果表明栅极电势低于 4.9V 时，电子仅和汞原子作弹性碰撞，由于电子质量远比汞原子质量小，电子不会损失能量，若电子的动能又不足以激发汞原子内部运动的能量，则碰撞是弹性的；当栅极电势达到 4.9V，电子的动能可使汞原子的内部运动能量激发，电子由于和汞原子作非弹性碰撞而损失能量后不能到达板极，电流骤降。由图 2 可见汞原子第一激发态和基态之间的能量差是 4.9V。所以汞原子内部的能量离散取值，这和经典物理中能量连续取值完全不一样。

电子多晶衍射 multi-crystal diffraction of electrons G.P.汤姆逊（G.P.Thomson）和塔尔塔科夫斯基（П.С.Тартаковский）在 1927 年做的慢电子衍射实验，他们用的靶样品不是一块单晶，而是分别由金、铝、铂等制成的多晶薄膜（由大量取向混乱的细微晶粒组成）。让一定能量的电子束穿过这片薄膜发生衍射，在薄膜后面的照相底板上形成同心圆环衍射图形，这种衍射图形与相近波长软 X 射线的多晶衍射图形完全可以对应起来，根据这些衍射环纹的半径可以计算出电子的波长。从而又一次证实了电子的波动性和定量验证了爱因斯坦-德布罗意关系的正确性。

图中（a）是用 X 射线，对于多晶态的铝样品得到的粉末衍射照相。图中（b）也是对于多晶态的铝样品，但是用电子束代替 X 射线，所得到的照相。



(a)

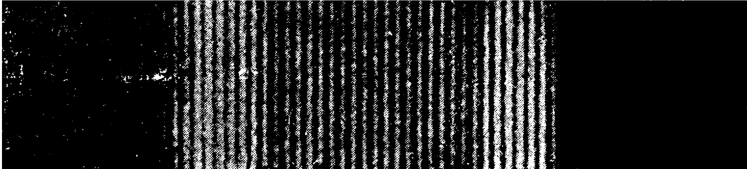


(b)

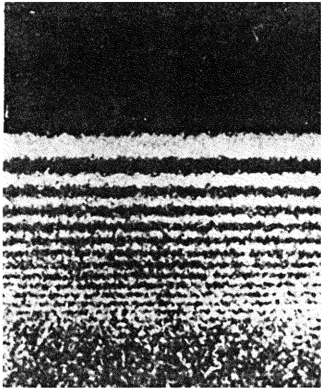
电子的单缝衍射 single-slit diffraction of electrons 将电子束聚焦成极细的缝状束，穿过用特殊技术在铜膜上制成的微米级宽度的狭缝，在狭缝后面的照相底板上得到电子的单缝衍射图。得到的图与光的单缝衍射图类似，从而进一步证实了电子的波动性。由于技术上的困难，此实验直到 1961 年才由英国科学家约恩逊（C.Jonsson）完成。

电子的双缝干涉 double-slit interference of electrons 将电子束聚焦成极细的缝状束，射

向用特殊技术在铜膜上制成的微米级宽度的双缝,在双缝后面作为屏的照相底板上得到电子的双缝干涉图。得到的双缝干涉图与光的双缝干涉图类似,进一步证实了电子的波动性。由于技术上的困难,此实验直到 1961 年才由英国科学家约恩逊完成。此前,在 1956 年,穆伦斯特德(G. Möllenstedt)和杜克(H. Düker)在电子显微镜中实现了电子束的双缝干涉。用一根带电的石英线置于显微镜中,即安装了相当于双棱镜的静电透镜,把电子束一分为二,再会聚到一起,得到电子束干涉照相,如图。这张照片确切无疑地表明电子和光一样,具有波动的特性。



电子的锐边衍射　sharp edge diffraction of electrons　把电子束射向 MnO 薄膜的一侧边缘(锐边)区,并在薄膜的阴影区放置底片,显示出的是电子的锐边衍射图,如下图。该图与光的锐边衍射图相似,提供了电子波动性的又一佐证。该实验是玻尔施(H. Boersch)于 1956 年实现的。

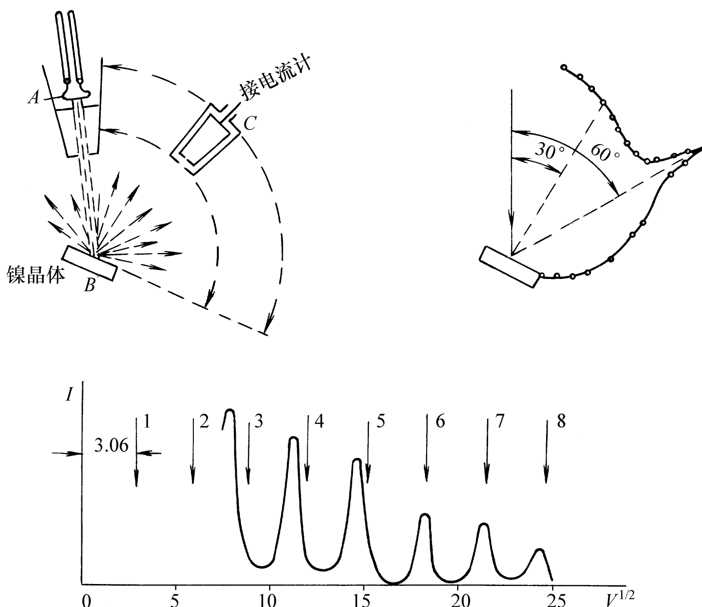


戴维逊–革末实验　Davisson-Germer experiment　1927 年,戴维逊和革末做了慢电子在镍单晶表面的衍射实验。根据爱因斯坦–德布罗意关系,慢电子束的德布罗意波长与软 X 射线的波长相近。因而为了显示电子的波动性,应采用软 X 射线在晶体光栅上衍射的相同方法。当电子的德布罗意波长满足布拉格(Bragg)公式

$$2d\sin\alpha = n\lambda = n\frac{12.25}{\sqrt{V}}(\text{Å}),$$

$$n = 1, 2, 3, \cdots$$

时,才发生相长干涉。式中 d 是晶格常数,α 是掠射角,V 是以伏特为单位的加速电压。实验中固定 α,调节 V,当 $\sqrt{V} = n\dfrac{12.25}{2d\sin\alpha}$时反射方向接收到的电子数(电流)取极大值。实验装置和实验结果如图所示。当 n 大时理论和实验符合得很好,这是因为布拉格公式的推导时,假定电子直线穿进晶体表面,这仅对应 n 大即 $V^{1/2}$大的情况。该实验不但证实了电子具有波动性,而且定量验证了爱因斯坦–德布罗意关系式。



弱光源杨氏双缝实验 Young's experiment with weak light source 所谓弱光源杨氏双缝实验是指在杨氏双缝实验中光源很弱,以至于光子是一个一个发出的,经过足够长的时间后,在屏上仍能观测到干涉条纹。这表明光的干涉不是光子和光子之间的干涉而是单个光子就具有波动性的体现。

二、量子力学的基本概念 *Basic Concept in Quantum Mechanics*

德布罗意波 de Broglie waves 从光有波粒二象性得到启迪,德布罗意相信自然界有对称性,假设所有微观客体都有波粒二象性。体现实物粒子波动性的这种波叫德布罗意波;其波函数用 $\psi(\boldsymbol{x}, t)$表示。对于有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 E 的自由粒子,其相应的德布罗意波是单色平面波,其角频率 ω 和波矢量 $\boldsymbol{k}$ 分别满足

$$E = \hbar\omega; \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

这称为爱因斯坦-德布罗意关系。它们联系了波粒二方面的性质,把对光的爱因斯坦关系推广到也适用于其他粒子。

波粒二象性 wave-particle duality 微观客体的波动性指它能像波那样运动传播,因此可由波场的叠加而产生干涉或衍射图形,但不像经典力学中的粒子循一条轨道运动;其粒子性指它和物质相互作用时采取粒子作用的方式,而不采取波场作用的方式。所以微观客体既不是经典物理的波,也不是经典物理的粒子。波粒二象性是沿用经典物理的术语,描述有新的本质的微客体。

波函数 $\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$的统计诠释 statistical interpretation of the wave function $\psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{t})$ 从电子的多晶衍射图形可看到:波场的强度大的地方,到达的电子数多;而波动相消强度为零的地方,没有电子到达。因此,电子到达 $\boldsymbol{x}$ 处 d^3x 范围的概率正比于$|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2$,

$$p(\boldsymbol{x}, t) = c\,|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2 d^3x \qquad (1)$$

可将比例系数并入$|\psi(\boldsymbol{x}, t)|^2$中,并要求总概率归一化,即在整个空间找到粒子的总概率为1,

$$\int |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 d^3x = 1$$

这等价于可令式(1)中的 c 为 1。由于偶然事件的概率是单值的，$\psi(\boldsymbol{x},t)$应是单值、连续、模方可积的。

波函数的统计诠释是玻恩(M.Born)在 1926 年提出的，统一了波粒二象性的矛盾。

归一化 normalization 若波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$满足

$$\int |\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 d^3x = c$$

c 是正实数，则应以$\frac{1}{\sqrt{c}}e^{i\varphi}\psi(\boldsymbol{x},t)$描述粒子的德布罗意波，这叫做波函数的归一化。归一化仅准确到常数相位 φ 可调。归一化的波函数确保粒子不会产生或消灭。

平面波 plane wave 平面波的同相位面是平面。根据爱因斯坦-德布罗意关系，有动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 $E=\frac{1}{2m}p^2$ 的自由粒子联系着有波矢量 $\boldsymbol{k}=\frac{1}{\hbar}\boldsymbol{p}$ 和角频率 $\omega=\frac{1}{\hbar}E$ 的平面波。由于薛定谔方程中包含虚数 i，故波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$应是复函数，因此自由粒子的德布罗意波应是

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x},t) = A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)\right]$$

对于以平面波 $\psi_{\boldsymbol{p}}$描写的量子态，粒子的动量 $\boldsymbol{p}$ 有完全确定的值，但粒子以相同的概率$|A|^2$出现在空间各处($\boldsymbol{x}$)，即位置是完全不确定的，这反映了自由空间的平移对称性。平面波状态不确定关系成立。

不难检验，对平面波状态难以进行归一化。因为未归一化的波函数，并不影响相对概率的描述，而相对概率通过相比较方式仍能反映物理状态，所以有时(例如研究散射时)也允许使用没有归一化的波函数，包括平面波。

量子态 quantum state 从电子的多晶衍射实验可见电子到达 $\boldsymbol{x}$ 处的概率密度是$|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2$，测量位置是一个统计问题。统计对象的状态是由测量有关参量(例如位置 $\boldsymbol{x}$)的统计分布来描述的，所以可用 $\boldsymbol{x}$ 的概率密度幅 $\psi(\boldsymbol{x},t)$(决定 $\boldsymbol{x}$ 的统计分布)描述量子态。在电子的多晶衍射实验中，若将一种多晶换成另一种多晶(晶格常数不同了)，则衍射图形也有变化，可见量子态(波函数)依赖于粒子所处的宏观条件。

叠加原理 superposition principle 在一定的宏观条件下，若 ψ_i，$i=1,2,\cdots$，是可能的波函数(量子态)，则它们的线性叠加

$$\psi = \sum_i c_i\psi_i$$

也是可能的波函数(量子态)。叠加系数 c_i 是复常数，起权重因子的作用，由初始波函数决定。叠加原理反映微观粒子具有波动性，由于线性叠加而有相干性。若 ψ_i 态是测准力学量 A 为 a_i 的态，则当测 A 的仪器实现 ψ 按各子波 ψ_i 的分解 $\psi\longrightarrow c_i\psi_i$，由于在 ψ_i 态测到 a_i 的概率为 1，则在有权重因子的 $c_i\psi_i$ 态测到 a_i 的概率为$|c_i|^2$.从这个角度看，叠加原理意味着测量的多值性。正是微观粒子的波动性，产生力学量测量的多值性。

波包 wave packet 波包的波场局限在空间的小范围内，其波函数仅在空间的小范围内有值，而波包的中心则以波包的群速度运动。

自由空间中可以存在有确定动量 $\boldsymbol{p}$ 和能量 $E=\frac{1}{2m}p^2$ 的自由粒子，其相应的平面波为 $\psi_{\boldsymbol{p}}$。根据叠加原理，自由空间中也可存在各种不同动量粒子所相应的平面波的线性叠加状态。对于一维的自由空间，有

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)\frac{e^{i(kx-\omega t)}}{\sqrt{2\pi}}dk \qquad (1)$$

若叠加系数 $\Phi(k)$仅在 k_0 附近取常值 Φ_0，

$$\Phi(k) = \begin{cases}\Phi_0 & k_0-\Delta k \leqslant k \leqslant k_0+\Delta k \\ 0 & k < k_0-\Delta k, k > k_0+\Delta k\end{cases} \qquad (2)$$

由于 $\Phi(k)$是在 $\psi(x,t)$态测到动量为 $k\hbar$ 的概率幅，式(2)表明测量动量的不确定度 $\Delta p \approx \Delta k\hbar$。当 Δk 为小量时，可写为

$$k = k_0+(k-k_0)$$

$$\omega \simeq \omega_0+\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0(k-k_0) \qquad (3)$$

那么群速 $u_g=\frac{d\omega}{dk}\approx\left(\frac{d\omega}{dk}\right)_0$，而式(1)经积分后为

$$\psi(x,t) = \frac{\Phi_0}{\sqrt{2\pi}}e^{i(k_0x-\omega_0t)}I \qquad (4)$$

调幅因子 I 为

$$I=\frac{2\sin(x-u_g t)\Delta k}{x-u_g t} \quad (5)$$

式(5)表明 $\psi(x,t)$是一个波包:波场基本上集中在一个小范围内;波包中心以群速 u_g 运动;并且 $\Delta x\Delta p\simeq 2\pi\hbar>\frac{\hbar}{2}$,即不确定关系成立。

如果式(3)取到$(k-k_0)$的二次幂,则叠加成波包的各平面波的相速和群速不等,波包将弥散。

箱归一化 box normalization 具有动量 $\boldsymbol{p}$、能量 E 的自由粒子的波函数 $\psi_{\boldsymbol{p}}=Ae^{\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}-Et)}$是难于归一化的。实际上并不存在体积无限大的自由空间。如果实验室的边长 L 比粒子的德布罗意波长 λ(对电子,$\lambda\simeq 10^{-10}$m)大很多,$\frac{L}{\lambda}\gg 1$,则可忽略边界的效应,这等价于把 L 理想化(简化)成无穷大。因此,回归物理真实,就可在实验室(箱)内对平面波进行归一化。既然可以不计边界的影响,则设想边界外的情况如何,对于箱内的自由粒子,更无物理影响。为了协调有限体积的实验室和无限大的自由空间的矛盾,可以设想宏观有限而以微观眼光看来很大的实验室作上下、左右、前后平移充满整个空间,而每个实验室的物理情况完全相同:

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z,t)&=\psi(x+L,y,z,t)\\&=\psi(x,y+L,z,t)\\&=\psi(x,y,z+L,t)\end{aligned}$$

于是若有一个粒子进入原实验室,则必有一个粒子出原实验室,因而保持原实验室中粒子数不变。所以可在原实验室中进行平面波的归一化,得到归一化系数 $A=L^{-3/2}$。由于要求满足周期性边界条件,得到动量分量不连续取值

$$p_i=n_i\frac{2\pi\hbar}{L};\ n_i=0,\pm1,\pm2,\cdots;$$

$$i=1、2、3$$

若 $L\to\infty$,则 p_i 又可连续取值。

薛定谔方程 Schrödinger equation 这是奥地利物理学家埃尔温·薛定谔在 1926 年提出的一个方程式:$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi$。式中 $i=\sqrt{-1}$,$\hbar=h/2\pi$,h 是普朗克常量,$\hat{H}$是微观系统的哈密顿算符,对于单粒子问题,$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+V$,$\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla$是粒子的动量算符,$\psi$ 是波函数,V 是势能。

薛定谔方程描述了波函数(量子态)的演化规律,是量子力学的基本假设之一,其正确性由理论计算和实验测量的一致而得到确认。由于方程中包含虚数 i,故波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$是复数。由于方程对时间 t 是一阶的,所以初始波函数 $\psi(\boldsymbol{x},0)$决定 t 时刻的波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$。因为 $\psi(\boldsymbol{x},t)$描述量子态,故对 t 一阶的薛定谔方程正好体现了因果性要求,在宏观条件(V 代表)确定时,初态决定 t 时刻的态。由于薛定谔方程是线性方程,所以叠加原理成立。方程中的势能 V 不同,则解出的 $\psi(\boldsymbol{x},t)$不同,体现了量子态依赖于宏观条件。

由于薛定谔方程中对时间的求导是一阶的$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)$而对空间坐标 x_i 的求导是二阶的$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\right)$,故对于洛伦兹(Lorentz)变换,薛定谔方程不是协变的,不适用于高能粒子。

连续性方程 continuity equation 由薛定谔方程可以导出连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0 \quad (1)$$

其中概率密度 $\rho=\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)$,概率流密度 $\boldsymbol{j}=\frac{\hbar}{2im}[\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*]$。式(1)是守恒律的微分表达形式,对其作整个空间的体积分,有

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\rho d^3x+\int d^3x\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0$$

根据高斯定理,$\nabla\cdot\boldsymbol{j}$ 的体积分可化成 $\boldsymbol{j}$ 在无穷远处界面上的面积分,注意到 ψ 在无穷远处趋向零,可得

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\psi^*\psi\,d^3x=0,$$

$$\int\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)d^3x=c$$

即总概率守恒。一般说,$\rho(\boldsymbol{x},t)$经空间积分后应是 t 的函数 $c(t)$,收敛性要求:$\psi(\boldsymbol{x},t)\xrightarrow[x\to\infty]{}0$。仅当 $\psi(\boldsymbol{x},t)$是薛定谔方程的解时,

才有总概率守恒。

定态 stationary state　定态的波函数是时空分离变量的驻波型波函数。当体系的哈密顿算符不显含时间，例如粒子在保守力场中运动，势能 $V(\boldsymbol{x})$ 与时间 t 无关，含时的薛定谔方程可以作时空分离变量解

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$$

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x})$$

以上方程称为定态薛定谔方程，也是能量的本征值方程，在 $\psi(\boldsymbol{x})$ 态测准能量为 E。对于定态，任何力学量的统计分布都不随时间演变，代表一个稳定的状态。从分离变量的时间因子 $T(t)=\exp\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et\right]$ 可见，正是含时薛定谔方程中出现虚数 i，才保证了 $T(t)$ 有时间的周期过程，反映波动性。

不确定关系 the uncertainty relation　若力学量算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 不可交换，则对任意的 ψ 态，都有关系：

$$\Delta A\Delta B\geqslant\frac{1}{2}\,|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle|$$

其中 ΔA 和 ΔB 分别是在 ψ 态测量力学量 A 和 B 的均方根偏差，$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$。对于一维运动的 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}_x$，由于 $[\hat{x},\hat{p}_x]=\frac{\hbar}{i}$，则有

$$\Delta x\Delta p_x\geqslant\frac{\hbar}{2}$$

即位置和动量不能同时测准，因此严格的轨道概念对于微观粒子失去意义。但如果受不确定关系制约的 Δx 和 Δp_x 分别小于特定物理条件下允许的误差，则轨道的概念仍然近似适用。在这种意义上，不确定关系给出了量子力学和经典力学的分界线。

左矢和右矢 bra and ket　由于微观客体的波粒二象性，量子力学中有叠加原理，测量力学量得到统计分布。因此可采用不同表象（对应不同的力学量完全集合的测量）表示同一个量子态，即可用不同的力学量完全集合的统计分布的概率幅表示同一个量子态。并且，不同力学量完全集合的统计分布概率幅之间可通过幺正变换相联系。这些性质意味着量子态是一个线性空间的矢量。狄拉克(Dirac)用 $|\psi\rangle$ 对应 $\psi(\boldsymbol{x})$，称右矢，$\langle\psi|$ 对应 $\psi^*(\boldsymbol{x})$，称左矢它们之间有关系

$$|\psi\rangle=\int\mathrm{d}^3x\psi(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x}\rangle,\hat{\boldsymbol{x}}|\boldsymbol{x}\rangle=\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}\rangle$$

$$\langle\psi|=\int\mathrm{d}^3x\psi^*(\boldsymbol{x})\langle\boldsymbol{x}|,$$

$$\langle\boldsymbol{x}|\hat{\boldsymbol{x}}=\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}$$

$\psi(\boldsymbol{x})$ 的归一化表示为

$$\int\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x=\langle\psi|\psi\rangle=1$$

束缚态与自由态 bound states and free states
求解定态薛定谔方程时，有两类边界条件分别对应束缚态与自由态（散射态）。

如果粒子在吸引力的作用下运动，势能函数在无限远处为零，则有限远处势能小于零（为负的），此时，如果粒子能量 E 小于零，则粒子不可能自动跑到无限远处去，它被限制在一定的有限空间范围内运动。描述粒子运动的波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 必须适当快地在无限远处趋近于零，使全空间的积分

$$\int\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}^3x$$

为有限，即 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ 可以归一化。此时粒子能量 E 只能取一些离散的数值，形成能级或能带。

如果粒子在吸引力的作用下运动，势能函数在无限远处为零，但粒子能量 E 大于零，或粒子在排斥力的作用下运动。在这种情况下，粒子有可能到无限远处去，即在无限远处找到粒子的概率不等于零。在无限远处，粒子不受力的作用，因而作自由运动，在无限远处，ψ 趋向平面波或球面波，这时积分 $\int\psi^*(\boldsymbol{x},t)\psi(\boldsymbol{x},t)\mathrm{d}^3x$ 是不收敛的，即不能归一化。只要粒子的能量大于无限处的势能（设为零），粒子总能到达无穷远处（遇到势垒，也可穿过），所以自由态的 E 取连续谱。对应连续谱的波函数 $\psi_E(\boldsymbol{x})$，数学上可按狄拉克的 δ 函数规格化

$$\int\psi_E^*(\boldsymbol{x})\psi_{E'}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x=\delta(E-E')$$

线性谐振子 linear harmonic oscillator　一维谐振子的哈密顿 $H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，相应

的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x)$$

由于势能在无穷远处无限大，对于有限的 E 对应的定态是束缚态，边条件为

$$\psi(x)\xrightarrow[x\to\pm\infty]{}0$$

严格解得的能量本征值和本征函数如下：

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ n=0,1,2,\cdots$$

$$\psi_n=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)\quad(1)$$

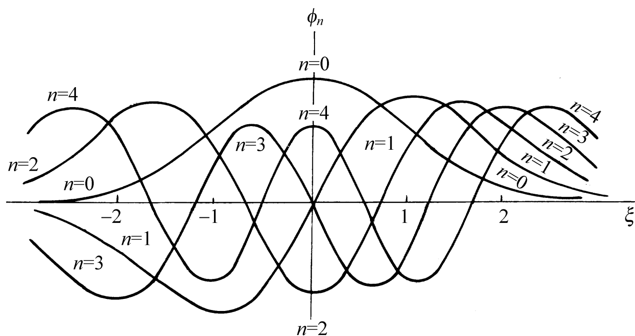
其中 H_n 为 n 阶厄米多项式(Hermite polynomials)，用生成函数方法得到

$$H_n(\xi)=(-1)^n(2^nn!\sqrt{\pi})^{-1/2}\cdot e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2}$$

式中 $\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$。$\psi_n$ 的图形如下。

从能量本征值 E_n 的表示式，可见当 $n=0$ 时能量最低。基态能量 $E_0=\hbar\omega/2$，称为零点能，这可从不确定关系得到解释。静止在 $x=0$ 点的状态是违背不确定关系的。

若 $E=\frac{1}{2}m\omega^2a^2$，根据经典力学，在 $|x|>a$ 的经典禁区，不可能出现粒子；根据量子力学关于谐振子波函数的表示式(1)，在 $|x|>a$ 的经典禁区，仍有可能出现粒子，只是概率随 $|x|$ 增大而指数衰减而已，可见由于存在波动性，粒子可适度透入势垒。由于不确定关系，位置和动量不能同时测准，所以不能把能量本征值划分为动能和势能各为多少，谈论粒子进入经典禁区引起负动能的基础已不再成立。



零点能 zero-point energy 参见“线性谐振子”条。线性谐振子的能量本征值 $E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$。对于 $n=0$ 的基态能量 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$，称为零点能。由于不确定关系，$\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$，线性谐振子不可能静止($p=0$ 确定)处于 $x=0$ 点(位置确定)。它只能处于零点振动状态。设零点能状态有总能量

$$\Delta E=\frac{1}{2m}(\Delta p)^2+\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

其中 Δx 和 Δp 满足不确定关系 $\Delta x\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}$，则

$$\Delta E\simeq\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{2\Delta x}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2$$

由 $\frac{\mathrm{d}\Delta E}{\mathrm{d}(\Delta x)^2}=0$，得 $(\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$，$\Delta E=\frac{\hbar\omega}{2}$。所以零点能确可借助不确定关系得到说明。

对于辐射场，标量势为零，矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足

$$\nabla^2\cdot\boldsymbol{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=0,$$

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0,\ c\text{ 为光速}\quad(1)$$

将 $\boldsymbol{A}$ 作傅氏级数展开

$$\boldsymbol{A}=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\sigma}(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}},\quad(2)$$

σ 代表偏振，将式(2)代入式(1)得到：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\sigma}(t)+\omega_k^2\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\sigma}=0$$

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\sigma}\cdot\boldsymbol{k}=0\quad(3)$$

其中 $\omega_k = ck$，c 是光速。由式(2)和(3)，可将辐射场看做各种简正模式(ω_k, σ)的谐振子的集合。当将场量子化后，各种模式谐振子的能量为 $E_{nk} = \left(n_k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_k$，$n_k$ 是以(ω_k, σ)模式振动的量子(光子)数。所以没有光子的电磁场是各种模式的谐振动都处在零振动的状态。处在高能级的原子通过和零振动状态的电磁场相互作用，导致所谓的自发辐射。自发辐射的光子，各种 $\boldsymbol{k}\sigma$ 都有可能，即可向各个方向传播。

能级 energy level　束缚态的能量取离散值，称为能级。由于处在束缚态的粒子不能自动到无穷远去，顾名思义应满足边界条件

$$\psi(\boldsymbol{x}) \xrightarrow[x \to \infty]{} 0$$

解定态薛定谔方程时，如果 $E < V(\infty)$，则存在束缚态，加上束缚态的边界条件，得到能量本征值取离散值。例如线性谐振子的能级 $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，氢原子的能级 $E_n = \frac{-e_s^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}$，$e_s = \frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}$ 由氢原子光谱的实验规律，加上光子的概念，容易得到能级的概念；弗兰克-赫兹实验证明了汞原子存在能级。参见“弗兰克-赫兹实验”条。能级之间的跃迁产生光的辐射或吸收。

1997年，华裔科学家朱棣文以及科恩-塔诺季(C. Cohen-Tannoudji)和菲利普斯(W. D. Phillips)三人荣获诺贝尔奖。他们发展的用激光冷却原子的所谓光学粘胶方法，也可验证原子存在能级。选择单色激光的波长，使其光子的能量 $\hbar\omega$ 等于原子的某个能级间距。当用这种激光照射原子，则光子可以被原子吸收，并使原子从低能级跃迁到高能级。如果光子迎着原子的运动方向射来，根据动量守恒定律，原子吸收光子后的运动速度会降低。处在高能级的原子通过自发辐射(参考零点能条)回到低能级，但可能向所有方位发射光子并使原子相应反冲。原子多次吸收光子，多次自发辐射的平均效果不会影响原子的运动速度。只要保证每次光子都是迎着原子运动方向射来而被吸收，则原子的速度将不断减小而被冷却到极低温度。用两两相对的、沿三个正交方向安排的六束激光来照射原子，就能保证每次光子都是迎着原子运动方向射到原子而被吸收。激光冷却原子方法的成功，有力地支持了原子存在能级的概念。

简并 degeneracy　如果力学量算符 $\hat{A}$ 的本征值方程 $\hat{A}\psi_{ni} = a_n\psi_i$，$i = 1, 2, 3, \cdots, f$ 即对于同一本征值 a_n，有 f 个线性无关的本征函数 ψ_{ni} 与它对应，则称 a_n 是 f 度简并的。由于 $\hat{A}$ 是线性厄米算符，本征值 a_n 是实数，而且对 ψ_{ni} 作任意线性叠加后，仍是 $\hat{A}$ 对应 a_n 的本征函数

$$\hat{A}\left(\sum_{i=1}^{f} c_i\psi_{ni}\right) = a_n\left(\sum_{i=1}^{f} c_i\psi_{ni}\right)$$

所以 a_n 对应一个 f 维的本征子空间，它由所有 $\hat{A}$ 算符的对应 a_n 的本征函数集合而成。

简并性和本征方程的对称性有关。设 $\hat{A}$ 在幺正变换 $\hat{U}$($\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1$)作用下不变：$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+ = \hat{A}$，则把 $\hat{U}$ 作用到 $\hat{A}$ 的本征方程的两边，有

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}\psi_{ni} = a_n\hat{U}\psi_{ni}$$

即

$$\hat{A}\hat{U}\psi_{ni} = a_n\hat{U}\psi_{ni}$$

所以 $\hat{U}\psi_{ni}$ 也是 $\hat{A}$ 的对应 a_n 的本征函数。

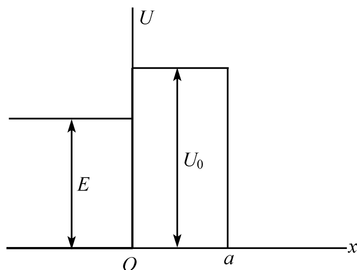
克拉默斯简并 Kramers degeneration　对于 $t \to -t$ 的时间反演变换 T，映射到量子态空间有时间反演算符 $\hat{T}$。当系统有时间反射对称性[$\hat{H}, \hat{T}$] = 0 时，两次时间反演导致的变换 $\hat{T}^2\psi$ 和 ψ 在物理上应该是等价的，所以 $\hat{T}^2\psi = c\psi$。由于系统的总自旋平方 $\hat{s}^2$ 的量子数 S 是整数或半奇整数，则可证相应的 c 分别为 1 或 -1。于是有时间反演对称性系统的量子态可分为二类：

$$\hat{T}^2\psi_+ = \psi_+, \hat{T}^2\psi_- = -\psi_-$$

因为$\hat{T}^2$是幺正算符,可证 ψ_+和 ψ_-正交:

内积$(\psi_+, \psi_-) = (\hat{T}^2\psi_+, \hat{T}^2\psi_-) = (\psi_+, -\psi_-) = 0$于是态空间划分成两个正交的子空间的直和。容易证明$(\hat{T}^2\psi_-, \psi_-) = 0$,这表明$\hat{T}^2\psi_-$和 ψ_-是两个独立的态。如果系统含有奇数个费米子,则 $c = -1$,设其能量本征态为$|E\rangle$,$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$,当系统具有时间反演对称性时,$\hat{H}\hat{T}|E\rangle = E\hat{T}|E\rangle$,所以$\hat{T}|E\rangle$和$|E\rangle$都是$\hat{H}$的对应 E 的本征态,即能量是简并的。这种性质称为克拉默斯简并。原子和固体中,都存在克拉默斯简并。

势垒穿透 potential barrier penetration 如图是一维长方形势垒,粒子的能量比势垒高度低。根据经典力学,从左边射来的粒子,因 $E < U_0$,它必定要在 $x = 0$ 处被反射回去。在量子力学中,由于粒子有波动性,对于从左边射来,能量 $E < U_0$ 的粒子,仍有概率穿透势垒出现在势垒的右方。



求解长方势垒的定态薛定谔方程

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0,\ k^2 = \frac{1}{\hbar^2}2mE > 0,$$

$$x < 0,\ x > a$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \alpha^2\psi = 0,$$

$$\alpha^2 = \frac{1}{\hbar^2}2m(U_0 - E) > 0,\quad 0 < x < a$$

得到

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx},\ x < 0 \\ Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x},\ 0 < x < a \\ Fe^{ikx},\ x > a \end{cases}$$

由于 $x > a$ 区域,势能为零,不受力的作用,不产生向左的反射粒子,故不出现 e^{-ikx}项。但在 $x > a$ 区域,有波函数 Fe^{ikx}存在,即有粒子出现在势垒的右方。应用 ψ 和$\frac{d\psi}{dx}$在 $x = 0$ 和 $x = a$的连续条件,可解出 A、B 和 F 的关系,并进一步得到透射系数 T 和反射系数 R

$$T = \frac{|F|^2 k\hbar/m}{|A|^2 k\hbar/m}$$

$$= \frac{16\alpha^2k^2}{(\alpha^2 + k^2)^2(e^{-\alpha a} - e^{\alpha a})^2 + 16\alpha^2k^2}$$

$$R = \frac{|B|^2 k\hbar/m}{|A|^2 k\hbar/m} = 1 - T$$

$T + R = 1$ 表示粒子数守恒。因 αa 常远大于1,可得 T 的简化表示式:

$$T = \frac{16\alpha^2k^2}{(\alpha^2 + k^2)^2}e^{-2\alpha a} = T(0)e^{-2\alpha a}$$

可见随着势垒宽度 a 或 $\alpha = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(U_0 - E)}$的增大,势垒穿透的相对概率变小。

势垒穿透也被称作隧道效应。在金属的场致发射、原子核的 α 衰变、半导体或超导体的隧道结中,势垒穿透得到实验的证明。隧道效应也是制造扫描隧道显微镜的理论基础。

量子系综 quantum ensemble 由于德布罗意波的统计诠释,量子力学是统计性的理论。原苏联的物理学家布洛欣采夫认为量子态是描述量子系综的,不是直接描述量子系统的。量子系综是由大量的相互独立而处在相同宏观环境下的量子系统的集合构成。由于测量仪器的作用,产生波函数的编缩,破坏了所测的量子系统。测量得到的力学量的统计分布,对于未经测量的量子系综中的其他系统碰到同类测量时是客观的描述。

隐变量 hidden variables 量子力学是统计性理论,用力学量的统计分布概率幅描述量子态。因此,爱因斯坦认为量子力学是不完备的。D.博姆(Bohm)曾建议了一种量子力学按"隐变量"而不是力学变量的决定论诠释,就是建议寻找偶然性背后的必然性。冯·诺依曼

(J. Von Neumann)证明了在现有量子力学适用的领域是找不到隐变量的。那么只有在量子力学可能失效的超微观世界,才有可能找到隐变量。

混合态 mixed state 混合态就是独立纯态以特定概率的集合。如果量子态由希尔伯特空间的一个矢量表示,则这种态称为纯态。对纯态 $|\psi\rangle$ 进行力学量 A 的测量,$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$,则

$$|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle \to \langle a_i|\psi\rangle|a_i\rangle;$$

测量后,系统处于$|a_i\rangle$态的概率 $W_i = |\langle a_i|\psi\rangle|^2$,$i=1,2,3,\cdots$。这种构成完备基的纯态$|a_i\rangle$以特定概率 W_i(权重)的集合,称为混合态。混合态包含二套集合:纯态$|i\rangle$的集合不同;相应的概率 W_i 的集合不同,则混合态不同。混合态是量子统计研究的对象。

玻尔磁子 Bohr magneton 玻尔磁子 $M_0 = \frac{e\hbar}{2m_e} = 9.2740\times10^{-24} JT^{-1}$,其中 e 为电子电荷,m_e 为电子质量,$\hbar$ 为普朗克常数。玻尔磁子是原子轨道磁偶极矩的最小单元,$M = -\sqrt{l(l+1)}M_0$,$M_z = -mM_0$,其中 l 是原子轨道运动的角(动量)量子数,m 为磁量子数,m 取值为 $0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$,共计$(2l+1)$种取法,对应轨道运动$(2l+1)$种不同空间投影。另外电子还有内禀磁矩,在任何方向投影为$\pm M_0$,只取两种投影。不论原子的轨道运动磁矩,还是内禀磁矩,都是以玻尔磁子为最小单元。

宇称 parity 空间反演算符$\hat{P}$既是幺正的又是厄米的,其本征值称为宇称量子数,

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{x}) \equiv \psi(-\boldsymbol{x});$$

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{x}) = p\psi(\boldsymbol{x});\ p=\pm1;$$

属于 $p=1$ 的 ψ 具有偶宇称,属于 $p=-1$ 的 ψ 具有奇宇称。例如,角动量算符(它与$\hat{P}$可对易)平方本征态的宇称量子数为$(-1)^l=\pm1$:

$$\hat{P}Y_{lm}(\theta,\phi) = Y_{lm}(\pi-\theta,\pi+\phi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta,\phi)$$

宇称是一个没有经典对应的纯粹量子概念,在量子力学与粒子物理中扮演着重要角色。当一体系的 Hamiltonian 具有空间反演不变性——即$\hat{P}$与$\hat{H}$可易时,则显然有:(1)$\hat{P}$与$\hat{H}$具有共同的本征函数,换言之,它是系统力学量完全集的组成部分,这个性质对相对论性理论具有重要意义;(2)如果一个态具有确定的宇称,则它将在随后的时间中保持不变——这称为宇称守恒定律,它在量子物理中有着广泛的应用与影响。空间反演变换性质不同的各种物理量矩阵元分别具有不同的宇称选择定则:在空间反演下按下式变换的两类算符$\hat{A}$与$\hat{B}$(参见“空间反演算符”):

$$\hat{P}\hat{A}\hat{P}^{-1} = \hat{A};\ \hat{P}\hat{B}\hat{P}^{-1} = -\hat{B}$$

分别称为偶算符与奇算符;偶算符(奇算符)在宇称相同(不相同)的态间的矩阵元才有可能不为零的矩阵元。这也就解释了宇称概念诞生前曾令人困惑的发现——原子具有两类不同的能级且两类能级间的跃迁存在一定规律。任意两个分别具有确定宇称的波函数的(直)乘积的宇称显然取决于原来两宇称的积,换言之,宇称为相乘性量子数——事实上,分立变换不变性导致的守恒定律总是相乘性的。正像除轨道角动量外还有自旋一样,除上述轨道宇称外,还可引入内禀宇称,这可通过指定参考粒子的内禀宇称及宇称守恒定律与其相乘性规则来实现(通常指定质子 p,中子 n 与 Λ^0 超子的内禀宇称为偶,其他强子的内禀宇称随之而定。这显然既与电磁学中指定毛皮或质子的电荷为正有着相似之处但也有重要的不同之处:由于具有不同相加性量子数——例如,电荷、重子数与超荷的系统间的相对宇称不可观测,必须为它们分别指定参考系统的宇称)。一般说来,Fermi 粒子与其反粒子的内禀宇称是相反的,例如,p,n,Λ^0 及电子 e^-的内禀宇称为偶的,而其反粒子 $\bar{p}$,$\bar{n}$,$\bar{\Lambda}^0$ 及 e^+的内禀宇称则为奇的;Bose 粒子与其反粒子有相同的内禀宇称,例如,赝标介子 π^+与 π^-,K^+与 K^-,它们的内禀宇称均为奇的,矢量粒子光子 γ 的内禀宇称也是奇的。另一方面,从描写粒

子的场量的类型来看,标量粒子与赝矢量粒子的内禀宇称均为偶的,而赝标量粒子与矢量粒子的内禀宇称均为奇的。这是由场量在空间反演下的变换性质决定的。反过来说,由粒子的内禀宇称与自旋又可确定描述粒子的场量类型。应当指出,如何恰当地指定或确定一个粒子的内禀宇称既有赖于理论的指导又有赖于实验的检验。最后,必须指出的是,在相对论范畴中,存在着部分地破坏宇称守恒定律的弱相互作用。宇称守恒定律的演进历史颇具启发意义地说明了一种概念怎样被发现、理解,奉为信条、怀疑、乃至推翻的过程。

对应原理 correspondence principle 在物理学中,有这样一个指导原则,即一个新的物理理论必须能解释“所有”的在旧的理论中已经被解释的现象。在20世纪初叶,当丹麦物理学家玻尔(N.Bohr)和其他一些物理学家在创建量子论的过程中就用这一原则来指导他们的工作,即要求在大量子数极限情况下,量子体系的行为将趋向于经典力学体系相同。对应原理同样也适用于其他的物理理论如相对论。

EPR 佯谬 Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) paradox EPR佯谬是指爱因斯坦、潘多尔斯基和罗森在1935年提出的一个思想实验,该实验揭示了对于一个大的空间域上的物理系统进行量子描述所具有的种种深刻的奇异性。实验涉及一对相距很远的同谋粒子A和B,所谓同谋的含义是指对粒子A的测量结果和对粒子B的测量结果之间存在高度关联。如果粒子A和B原本处于混合态,也就是说不处于某一个确定的本征态,当对粒子A进行测量后确定它处于某一个本征态,那么就可以确定的预言粒子B也处于相应的某一个本征态。玻尔认为在EPR实验中,相距很远但关联着的同谋粒子(A,B),构成量子系统的一个不可分割的部分。虽然没有直接的信号在A和B之间穿过,它们仍俨如同谋一般在其行动中进行合作。但是爱因斯坦认为,由于A和B相距充分远,任何的物理力的传递又不能超过光速,对远离粒子中的每一个粒子作表观独立的测量,所给出的结果竟同谋合作得如此充分,让人无法接受。他将它嘲讽为“幽灵式的超距作用”。即使在今天,如何在物理上真正解决EPR佯谬,给出令所有人都信服的答案,仍然有待作深入细致的研究。

贝尔不等式 Bell inequality 贝尔不等式是1965年贝尔提出的一个强有力的数学定理。该定理在定域性和实在性的双重假设下,对于两个分隔的粒子同时被测量时其结果的可能关联程度建立了一个严格的限制。而量子力学预言,在某些情形下,合作的程度会超过贝尔的极限,也即,量子力学的常规观点要求在分离系统之间合作的程度超过任何“定域实在性”理论中的逻辑许可程度。贝尔不等式提供了用实验在量子不确定性和爱因斯坦的定域实在性之间做出判决的机会。目前的实验表明量子力学正确,决定论的定域的隐变数理论不成立。

贝利相位 Berry phase 考虑某个量子系统,其哈密顿量 H 是一组参量 $\boldsymbol{R}=(R_1, R_2, \cdots, R_D)$ 的函数,设 $\boldsymbol{R}$ 随时间 t 作周期性变化 $\boldsymbol{R}(T)=\boldsymbol{R}(0)$,该周期性变化在参量空间定义了一条闭合曲线 C。记哈密顿量的瞬时本征态为 $|n(\boldsymbol{R}(t))\rangle$,相应的本征值为 $E_n(\boldsymbol{R}(t))$,那么 T 时刻的态矢量有两个相位因子:其一 $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^T E_n(\boldsymbol{R}(t')\mathrm{d}t'\right]$ 称为动力学相位因子;另一个相位因子 $\exp[i\gamma_n(C)]$, $\gamma_n(C)=i\int\langle n(\boldsymbol{R}(t))|\nabla_R n(\boldsymbol{R}(t))\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{R}$ 就是著名的贝利相位。贝利相位仅与演化路径的几何结构有关,所以又称为几何相位。贝利相位是一个可观测量。如果记 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})=i\langle n(\boldsymbol{R})|\nabla_R n(\boldsymbol{R})\rangle$ 为某种势,那么贝利相位 $\gamma_n=\oint_c \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{R}=\oint\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla_R\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$ 实际上是相应的场 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R})=\nabla_R\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})$ 的通量。贝利相位给出了阿哈伦诺夫-博姆效应的更一般的形式,它不局限于电磁场。

厄仑费斯特定理 Ehrenfest theorem 只要势能在波包范围内的变化小到可以忽略,总可以期望波包的运动同相应的经典粒子的运动一样。如果波包的“位置”矢量和“动量”矢量指的是这些量的加权平均值或期望值,则经典

运动和量子运动总是一致的，即：

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle=\frac{1}{m}\langle p_x\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\rangle$$

其中 x 和 p_x 是粒子的直角坐标和相应的动量，m 是粒子的质量，V 是势能，$\langle\cdots\rangle$ 表示求量子力学平均。厄仑费斯特定理提供了对应原理的一个例子，因为它表明，每当期望值很好的代表了经典变量时，波包就像经典粒子那样运动；这通常是波包的有限大小和内部结构可以忽略时的宏观极限情况。

隧道效应 tunnel effect　参考"势垒穿透"条。粒子在其能量小于势垒高度时仍能贯穿势垒的现象称为隧道效应或势垒贯穿。这是一种没有经典类比的纯粹量子效应，据其原理不仅可解释原子核的 α 嬗变与金属电子冷发射等物理现象，而且还可研制固体器件，如半导体隧道二极管与超导隧道结等。粒子穿透势垒的本领以透射系数——即穿透概率来衡量。当势垒为方形时，解薛定谔方程可证，粒子的透射系数为

$$T=\frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2+k_2^2)^2\sinh^2 k_2a+4k_1^2k_2^2};$$

$$k_1=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}};\ k_2=\sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}},$$

式中 E 为粒子的能量，U_0 与 a 分别为势垒的高度与宽度。通过推广上式的准经典近似：$T\approx\exp\{-\frac{2a}{\hbar}\cdot\sqrt{2m(U_0-E)}\}$，$(k_1\sim k_2, k_2a\gg1)$，即得势垒 $U(x)$ 为任意形状（以 a 与 b 标记经典转向点）时透射系数的准经典近似式

$$T\approx\exp\{-\frac{2}{\hbar}\int_a^b dx\cdot\sqrt{2m[U(x)-E]}\}。$$

斯塔克效应 Stark effect　原子在外电场中发光，谱线发生分裂或移动的现象称为斯塔克效应。类氢原子因其能级的 Coulomb 简并性而具有电偶极矩，它与外电场的互作用能正比于其强度，即劈裂后的能级的间隙线性依赖于电场强度，这样的能级分裂现象称为一级（或线性）斯塔克效应。（这里未涉及电场弱至必须计及导致 Coulomb 简并性解除的 Lamb 移动的情形，它属于相对论范畴。）外电场（设沿 z 方向）的强度 E 通常远小于原子内部电场的强度，因而电子在其中的势能 $\hat{H}_1=eEz$ 可当作微扰处理，对第一激发态所得能级一级修正值为

$$E_{21}^{(1)}=3ea_0E,\ E_{22}^{(1)}=-3ea_0E,$$

$$E_{23}^{(1)}=E_{24}^{(1)}=0。$$

碱金属原子因其原子实电场偏离 Coulomb 对称性而不存在电偶极矩，但在外电场作用下将发生极化而产生感生电偶极矩，它与电场的互作用能显然比例于电场强度的平方，由此引起的能级移动现象称为二级（或平方）斯塔克效应。

塞曼效应 Zeeman effect　原子在外磁场中发光谱线发生分裂且偏振的现象称为塞曼效应；历史上首先观测到并给予理论解释的是谱线一分为三的现象，后来又发现了较三分裂现象更为复杂的难以解释的情况，因此称前者为正常或简单塞曼效应，后者为反常或复杂塞曼效应。事实上，正常塞曼效应只不过是属一般情况的反常塞曼效应的特例——当外磁场由弱趋强时，反常塞曼效应趋于正常塞曼效应，这一过渡过程称为 Paschen-Back 效应。设外磁场比原子的内部磁场强得多，则自旋与轨道的互作用可略去不计，于是，计入外磁场 $\boldsymbol{B}$（设沿 z 方向）引起的附加能量后，一价原子的能级为 $E=E_{nl}+(m+2s_z)\omega_L$；$\omega_L=eB/2\mu$。考虑到电偶极跃迁过程不能改变自旋态，遂由上式知原来频率为 ω_0 的一条谱线分裂为分别属 π 与 σ 偏振态的三条谱线：$\omega_\pi=\omega_0$，$\omega_\sigma=\omega_0\pm\omega_L$。当外磁场弱至需与自旋-轨道耦合一起处理时，由微扰论可证谱线的分裂数不止三条。

自发辐射 spontaneous emission　即使没有光线入射，原子中处于较高能级的电子，也可以自发的从较高的能级跃迁到较低的能级并发出光子，这就是自发辐射现象。严格说来，只靠量子力学，无法处理自发辐射。这是因为原子中的电子虽然处在较高的能级，但仍处在定态，在无外来作用的情况下，按量子力学，它应该永远处在这个定态，不可能自发跃迁。事实上，严格处理光的自发辐射现象应该用量子电动力学，在量子电动力学中，电磁场也是量子化的，而光的自发辐射现象是电磁场的真空

涨落效应的表现。这就是说，由于电磁场是量子化的，所以没有光线入射并不能说没有电磁场，而只是代表电磁场的平均值为零，但是电磁场围绕它的平均值的量子涨落并不为零，正是这一不为零的量子涨落提供了相互作用导致了自发辐射现象。

受激跃迁 induced transition 量子体系在外来作用的影响下从一个定态转变为另一个定态被称为受激跃迁。设体系的初态记为$|i\rangle$，末态记为$|f\rangle$，外来作用的哈密顿量为H'，那么受激跃迁的概率正比于相互作用哈密顿量在初态和末态之间的矩阵元的模方，即$|\langle f|H'|i\rangle|^2$。例如：原子中的电子在辐射场的作用下从高能级跃迁到低能级并发出一个光子，或从低能级跃迁到高能级并吸收一个光子的现象称为光的受激发射和吸收，这就是一种典型的受激跃迁。

好量子数 good quantum number 在量子力学中，标记力学量的本征值的指标称为量子数，若该力学量是守恒量（即与哈密顿量对易）那么相应的量子数就称为好量子数。利用好量子数可以使哈密顿量的矩阵准对角化从而大大简化计算工作量。

矩阵力学 matrix mechanics 矩阵力学是与薛定谔波动力学等价的，描述量子体系的另一种数学表述方式，由德国物理学家海森伯（W. Heisenberg）提出，其中量子体系的力学量是用矩阵来表述的。

薛定谔方程的经典极限 classical limit of schrödinger equantion 如果普朗克常数 ħ 可当作零对待，则将薛定谔方程的解写成

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=A\exp\left[\frac{i}{\hbar}W(\boldsymbol{x},t)\right] \quad (1)$$

时，W就是经典力学中雅可比-哈密顿方程的解。所以薛定谔方程的经典极限与雅可比-哈密顿方程对应。

将薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{x},t)+V(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t)$$

的解写成(1)式，其中A是常数，而$W(\boldsymbol{x},t)$满足方程

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\nabla W)^2+V-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 W=0$$

取经典极限，令$\hbar\to 0$，则以上方程退化为雅可比-哈密顿方程

$$\frac{\partial W}{\partial t}+H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})=0,\ \boldsymbol{p}=\nabla W$$

由于$\boldsymbol{p}$等于W的梯度，可能的经典轨道正交于$\psi(\boldsymbol{x},t)$的等相位面。经典极限成立，必须满足

$$\frac{1}{2m}(\nabla W)^2\gg\left|\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 W\right| \ 即\ \frac{p^2}{2m}\gg\frac{\hbar}{2m}\nabla\cdot\boldsymbol{p}$$

这意味着经典力学适用的条件为动能较大（德布罗意波长短）而且动量的散度较小。对于一维运动，$p(x)=\sqrt{2m[E-V(x)]}$，要求$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}$较小，即要求力场变化缓慢。

克莱因-戈尔登方程 Klein-Gordon equation

单粒子薛定谔方程，对于洛伦兹变换不是协变的，因此不能描述高能的有波动性的粒子。克莱因-戈尔登方程是推广薛定谔方程而得到的第一个相对论性波动方程。自由粒子的薛定谔方程可看成从经典力学的非相对论能量方程$E=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}$出发，作代换

$$E\to\hat{E}=i\frac{\partial}{\partial t},\ \boldsymbol{p}\to\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{1}{i}\nabla \quad (1)$$

并作用于波函数$\psi(\boldsymbol{x},t)$而得到。已采用取$\hbar=c=1$的自然单位制。因此，自然会设想：自由粒子的相对论性波动方程，可由自由粒子的经典相对论能量方程$E^2=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}+m^2$出发，同样作变换(1)并作用于波函数而得到

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi=-\nabla^2\psi+m^2\psi$$

其中m是粒子的静质量。采用重复指标表示求和的约定，注意$x_4=it$，则得到自由粒子的克莱因-戈尔登方程，简称K-G方程

$$\partial_\mu\partial_\mu\psi-m^2\psi=0,$$

$$\left(\partial_\mu\partial_\mu=\sum_{\mu=1}^{\psi}\frac{\partial}{\partial x_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right) \quad (2)$$

对于薛定谔方程，从带正电荷e的自由粒子到受电磁场$A_\mu(\boldsymbol{A},i\varphi)$作用，只需要作代换

$$\partial_\mu\to\partial_\mu-ieA_\mu$$

将此种代换同样施加于自由粒子的K-G方程，

得到带电 e 粒子在电磁场中的 K-G 方程

$$(\partial_\mu - ieA_\mu)(\partial_\mu - ieA\mu)\psi - m^2\psi = 0$$

由于 K-G 方程中的 $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$，不能再将 ψ 假释为量子态的时空表象，因为因果律得不到满足。1934 年泡利(W.Pauli)建议将 K-G 方程解释为场方程。如果 ψ 是洛伦兹变换的标量，则式(2)是自由介子场的场方程。

狄拉克相对论方程 Dirac relativistic equation　参考“克莱因–戈尔登方程”。单粒子的薛定谔方程包含对时间 t 的一阶求导，对空间坐标 x_i 的二阶求导，因此对于洛伦兹变换不是协变的，不适用于有波动性的高能粒子。克莱因–戈尔登方程包含对 t 的二阶求导，因此不能用波函数描述量子态；因为量子态必须满足因果律，初态决定 t 时的态，量子态的演化规律只能是对 t 一阶求导的微分方程。为了得到对 t 一阶求导的相对论性方程，1927 年狄拉克从 $E=\sqrt{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}+m^2}$ 出发研究。若粒子只有轨道运动，动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{i}\nabla$ 出现在根号内，哈密顿算符是非线性算符。考虑粒子的内禀运动，$\hat{\boldsymbol{p}}$ 是以 $\frac{\hbar}{i}\nabla$ 为对角项的对角矩阵，有可能将 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 从根号中开出来而使哈密顿算符是线性的算符。狄拉克建议了自由粒子的相对论性方程

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = (\alpha\cdot\boldsymbol{p}+\beta m)\psi = \hat{H}\psi \tag{1}$$

这是在 $\hbar=c=1$ 的自然单位制中的表示，其中 α 和 β 为 4 行 4 列的数字矩阵，是内禀运动态空间的算符，它们的代数性质由

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+m^2=(\alpha\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta m)^2$$

决定。注意 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 和 α 及 β 可交换；α_i 和 β 不可交换，得到

$$\begin{cases}\beta^2=1\\ \beta\alpha_i+\alpha_i\beta=0,\ i=1,2,3\\ \alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=2\delta_{ij}\end{cases} \tag{2}$$

在 β 为对角的表象，得到狄拉克代数的 4 维表示

$$\beta=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix},\ \alpha_i=\begin{vmatrix}0 & \sigma_i\\ \sigma_i & 0\end{vmatrix},$$

其中 1 是 2×2 的幺矩阵，σ_i 是 2×2 的泡利矩阵。于是式(1)中的 ψ 是 4 行 1 列矩阵

$$\psi(x_\mu)=\begin{vmatrix}\psi_1(x_\mu)\\ \psi_2(x_\mu)\\ \psi_3(x_\mu)\\ \psi_4(x_\mu)\end{vmatrix}$$

为了将狄拉克方程写成更对称形式，定义 γ 矩阵

$$\gamma_\mu=\begin{cases}\gamma=-i\beta\alpha\\ \gamma_4=\beta\end{cases}$$

由式(2)得到

$$\gamma_\mu\gamma_\nu+\gamma_\nu\gamma_\mu=2\delta_{\mu\nu}$$

狄拉克方程可改写成：

$$\left[\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}+m\right]\psi=0 \tag{3}$$

当带电荷 $-e$ 的粒子处在电磁场 $A_\mu(\boldsymbol{A}, i\varphi)$ 的作用下，由自由粒子的薛定谔方程到电磁场作用下的薛定谔方程仅需作代换

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\to\frac{\partial}{\partial x_\mu}+ieA_\mu$$

将此代换施加于自由粒子的狄拉克方程(3)，得到电磁场作用下的狄拉克方程，

$$\left[\gamma_\mu\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}+ieA_\mu\right)+m\right]\psi=0$$

狄拉克方程的非相对论极限是包含自旋变量的薛定谔–泡利方程。要使狄拉克方程对洛伦兹变换协变，ψ 也要作相应的变换(洛伦兹群在 ψ 集合成的空间的表示)，这种变换决定粒子的自旋 $S=1/2$。狄拉克方程中存在 $\alpha\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ 项，意味着轨道运动和内禀运动有耦合。对于矢量势 $\boldsymbol{A}$ 为零，标量势为有心力场 $V(r)$ 的情形，将狄拉克方程作非相对论极限，可得到自旋和轨道运动的耦合作用

$$\hat{H}_{LS}=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}U(r)}{\mathrm{d}r}\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\boldsymbol{S},$$

$$U=-eV(r)$$

其中光速 c 的引入，用以表示量级大小。

三、量子力学的数学表述
Mathematical Presentation in Quantum Mechanics

希尔伯特空间 Hilbert space 各种量子态矢量$|\psi\rangle$(它在坐标表象的波函数为$\psi(\boldsymbol{x})$)的集合,且该集合对于线性运算是封闭的,则构成一个空间。如果态矢的模方$\langle\psi|\psi\rangle$都是有限的,可归一化,则该空间称为希尔伯特空间。这是一个无穷维的复空间(线性运算中的数乘用的数是复数),而且是定义了内积(标量积)为复数的幺正空间。由于理想化的简化假设,量子力学中使用平面波、δ函数等不可归一化的波函数;而且经常使用坐标和动量表象,所以量子力学中使用的希尔伯特空间中也包含着不可归一的态矢量。若以力学量算符$\hat{A}$的本征矢量$|a_n\rangle$, $n=1,2,\cdots$,作为量子态空间的基矢组,$\hat{A}|a_n\rangle=a_n|a_n\rangle$,则

$$|\psi\rangle=\sum_n\langle a_n|\psi\rangle|a_n\rangle$$

若取坐标表象,则

$$|\psi\rangle=\int d^3x\langle\boldsymbol{x}|\psi\rangle|\boldsymbol{x}\rangle=\int d^3x\psi(\boldsymbol{x})|\boldsymbol{x}\rangle$$

力学量算符 dynamical variables as operators 微粒子有波动性,叠加原理使在ψ态测力学量A得到不同值的统计分布。理论上,为了求A的平均值引入力学量算符$\hat{A}$

$$\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi d^3x=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

例如动量算符$\hat{\boldsymbol{p}}$和坐标算符$\hat{\boldsymbol{x}}$分别满足

$$\langle\boldsymbol{p}\rangle=\int\psi^*\frac{\hbar}{i}\nabla\psi d^3x,\ \hat{\boldsymbol{p}}\psi=\frac{\hbar}{i}\nabla\psi$$

$$\langle\boldsymbol{x}\rangle=\int\psi^*\hat{\boldsymbol{x}}\psi d^3x,\ \hat{\boldsymbol{x}}\psi=\boldsymbol{x}\psi$$

由于力学量A一般是$\boldsymbol{x}$和$\boldsymbol{p}$的函数,例如$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$,那么$A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})$的算符$\hat{A}$如何?量子力学假设

$$A(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})\longrightarrow\hat{A}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}})$$

称为一次量子化,并要求广义坐标q_j和广义动量p_k算符满足量子条件

$$[\hat{q}_j,\hat{q}_k]=0,[\hat{p}_j,\hat{p}_k]=0,$$

$$[\hat{q}_j,\hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk},$$

上式中的方括号代表交换运算,

$$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}。$$

为了确保叠加原理成立,力学量算符应是线性算符(linear operator)

$$\hat{A}[c_1\psi_1+c_2\psi_2]=c_1\hat{A}\psi_1+c_2\hat{A}\psi_2$$

为了确保平均值$\langle A\rangle$是实数和$\hat{A}$的本征值a是实数,力学量算符$\hat{A}$应是厄米(自伴)算符$\hat{A}^+=\hat{A}$。$\hat{A}$的厄米共轭(伴随)算符$\hat{A}^+$定义为

$$\int\psi_1^*\hat{A}^+\psi_2d^3x=\int\psi_2(\hat{A}\psi_1)^*d^3x$$

故厄米算符$\hat{A}^+=\hat{A}$满足

$$\int\psi_1^*\hat{A}\psi_2d^3x=\int\psi_2(\hat{A}\psi_1)^*d^3x$$

量子条件 quantum condition 量子条件是量子力学的基本假设之一。参见“力学量算符”。若系统的广义坐标为q_j,共轭的广义动量为p_j, $j=1,2,\cdots,n$,则它们的算符$\hat{q}_j$、$\hat{p}_j$满足对易关系

$$[\hat{q}_j,\hat{q}_k]=0,[\hat{p}_j,\hat{p}_k]=0,$$

$$[\hat{q}_j,\hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk}$$

有了量子条件,有经典类比的力学量算符$\hat{A}$的意义才得以明确。

投影算符 projection operator 将$|\psi\rangle$投影到$|a_n\rangle$的算符写为$|a_n\rangle\langle a_n|$,它对$|\psi\rangle$的作用定义为

$$(|a_n\rangle\langle a_n|)|\psi\rangle=|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle$$

式中$\langle a_n|\psi\rangle$为求内积。$|a_n\rangle\langle a_n|$把$|\psi\rangle$变为$|a_n\rangle$乘上复数$\langle a_n|\psi\rangle$,所以$|a_n\rangle\langle a_n|$确是投影到$|a_n\rangle$的算符。$|a_n\rangle\langle a_n|$也可对左矢$\langle\psi|$作用

$$\langle\psi|\left(|a_n\rangle\langle a_n|\right)=\langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|$$

式中$\langle\psi|a_n\rangle$为内积。投影算符$|a_n\rangle\langle a_n|$中的

右矢$|a_n\rangle$和左矢$\langle a_n|$是互为共轭的，也可推广为有序算符$|a\rangle\langle b|$，这是其中的左、右矢不互为共轭的 ket-bra 算符。

算符代数 operator algebra 算符相等$\hat{A}=\hat{B}$定义为对任意的ψ有

$$\hat{A}\psi=\hat{B}\psi$$

算符相加$\hat{c}=\hat{A}+\hat{B}$定义为对任意的ψ有

$$\hat{c}\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi$$

算符相乘$\hat{c}=\hat{A}\hat{B}$定义为对任意的ψ有

$$\hat{c}\psi=\hat{A}(\hat{B}\psi)$$

完备性条件 condition of the completeness 如果正交归一的基矢组$|a_n\rangle$，$n=1,2,3,\cdots$，是完备的，则$|\psi\rangle$按基矢组展开一定是收敛的

$$|\psi\rangle=\sum_n\langle a_n|\psi\rangle|a_n\rangle$$

利用投影算符$|a_n\rangle\langle a_n|$，则

$$|\psi\rangle=\{\sum_n|a_n\rangle\langle a_n|\}|\psi\rangle$$

于是基矢组的完备性条件为

$$\sum_n|a_n\rangle\langle a_n|=1$$

平均值的演化 evolution of average value $\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}^3x$。$\psi(\boldsymbol{x},t)$满足薛定谔方程。

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}^3x$$

$$=\int\psi^*\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\psi\mathrm{d}^3x+\int\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi\mathrm{d}^3x$$

$$+\int\psi^*\hat{A}\frac{\partial\psi}{\mathrm{d}t}\mathrm{d}^3x$$

代入薛定谔方程及其复共轭方程，利用$\hat{H}^+=\hat{H}$，得到

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]\rangle \qquad (1)$$

定义$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}$算符

$$\langle\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\rangle=\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}$$

则式(1)可写成等价的公式

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \qquad (2)$$

由于以上推导中没有用到$\hat{A}=\hat{A}^+$，故对非厄米的算符$\hat{A}$，式(2)仍成立。设$\hat{A}=\hat{x}$为一维的位置算符，$\hat{H}=\frac{1}{2m}p^2+V(x)$，由式(2)得到

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}}{\mathrm{d}t}=\frac{\hat{p}}{m}=\hat{v}$$

可见所定义的$\frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}$有很好的经典类比。

运动恒量 constant of motion 参见平均值的演化条，若力学量算符$\hat{A}$不含时间t，而且$[\hat{A},\hat{H}]=0$时，有$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=0$，这样的力学量$A$叫做运动恒量(运动积分)。标志运动恒量算符$\hat{A}$的本征值$a_m$的量子数$m$，称为好量子数。对于运动恒量，不但平均值$\langle A\rangle$不随时间演变；在系统的态$\psi(\boldsymbol{x},t)$测到$a_m$的概率也不随时间改变。设系统的哈密顿算符$\hat{H}$不含时(薛定谔绘景)，由于$[\hat{A},\hat{H}]=0$，它们有共同的本征函数$\psi_{nm}(\boldsymbol{x})$

$$\hat{H}\psi_{nm}(\boldsymbol{x})=E_n\psi_{nm}(\boldsymbol{x});$$

$$\hat{A}\psi_{nm}(\boldsymbol{x})=a_m\psi_{nm}(\boldsymbol{x})$$

系统的态$\psi(\boldsymbol{x},t)$是定态波函数的线性叠加

$$\psi(\boldsymbol{x},t)=\sum_{nm}C_{nm}\psi_{nm}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}$$

根据叠加原理，叠加系数C_{nm}是常数。在$\psi(\boldsymbol{x},t)$态同时测得E_n、a_m的概率为$|C_{nm}\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}|^2=|C_{nm}|^2$与$t$无关；则在$\psi(\boldsymbol{x},t)$态测得$a_m$的概率$\sum_n|C_{nm}|^2$也与$t$无关。

本征值方程 eigenvalue equation 力学量算符$\hat{A}$的本征值方程为

$$\hat{A}\psi_a(\boldsymbol{x})=a\psi_a(\boldsymbol{x}) \qquad (1)$$

其中a称为本征值，$\psi_a(\boldsymbol{x})$称为算符$\hat{A}$对应本

征值 a 的本征函数。若 $\psi_a(\boldsymbol{x})$ 是本征矢 $|a\rangle$ 在坐标表象的波函数，则式(1)可写成

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$

设 $\langle a|a\rangle=1$，则在 $|a\rangle$ 态测量力学量 A 得到惟一准确的值 a(本征值)。因为 $a=\langle a|\hat{A}|a\rangle$ 是平均值，而 $(\Delta A)^2=\langle a|\hat{A}^2|a\rangle-\langle a|\hat{A}|a\rangle^2=0$，所以在本征态 $|a\rangle$，测 A 得到准确值 a。

正交归一的本征函数系 orthonormal eigenfunctions 任何厄米算符的属于两个不同本征值的本征函数总是正交的：设 $\hat{A}\psi_a=a\psi_a$，a 是实数，则 $\int\psi_{a'}^*(\boldsymbol{x})\psi_{a'}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x=0$，当 $a\neq a'$。证明如下：因 $\hat{A}=\hat{A}^+$，则

$$\begin{aligned}0 &= \int\psi_{a'}^*\hat{A}\psi_a\mathrm{d}^3x-\int\psi_{a'}^*\hat{A}^+\psi_a\mathrm{d}^3x\\ &= a\int\psi_{a'}^*\psi_a\mathrm{d}^3x-\int\psi_a(\hat{A}\psi_{a'})^*\mathrm{d}^3x\\ &=(a-a')\int\psi_{a'}^*\psi_a\mathrm{d}^3x\end{aligned}$$

当 $a\neq a'$，有 $\int\psi_{a'}^*\psi_a\mathrm{d}^3x=0$

如果 a 属于离散谱：$a_1, a_2, \cdots a_n\cdots a_m\cdots$ 则 ψ_n 是可归一化的，结合正交性，有

$$\int\psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}^3x=\delta_{mn}$$

如果 a 属于连续谱，则 ψ_a 是不好归一化的，例如动量的本征函数。连续谱的正交规格化为

$$\int\psi_{a'}^*(x)\,\psi_a(x)\mathrm{d}^3x=\delta(a'-a)$$

本征函数系的完备性 completeness of eigenfunctions 存在一条数学定理：满足一定条件的厄米算符的本征函数系是完备的，使得任意波函数可以用它们来展成广义傅里叶级数。我们假设代表力学量的算符 $\hat{A}$ 的本征函数系都满足必要的数学条件，所以

$$\psi=\sum_n C_n\psi_n+\int\mathrm{d}a\,C(a)\,\psi_a$$

其中 C_n、$C(a)$ 是展开系数，ψ_n 和 ψ_a 分别是对应离散谱 a_n 和连续谱 a 的本征函数。完备性条件为

$$\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|+\int\mathrm{d}a\,|\psi_a\rangle\langle\psi_a|=1$$

参见“投影算符”和“完备性条件”。

位置的本征函数 eigenfunction of position 测量粒子的位置有准确值 $\boldsymbol{x}_0$ 的本征函数 $\psi_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x})$ 满足

$$\hat{\boldsymbol{x}}\psi_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}_0\psi_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x})$$

注意到在坐标表象，$\hat{\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}\psi(\boldsymbol{x})$，则解得

$$\psi_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x})=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$$

本征值 $\boldsymbol{x}_0$ 可连续变化，对应的本征函数 $\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_0)$ 不可归一化，但满足连续谱对应本征函数的规格化条件

$$\int\psi_{\boldsymbol{x}_0}^*(\boldsymbol{x})\,\psi_{\boldsymbol{x}_0'}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x=\delta(\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}'_0)$$

动量的本征函数 momentum eigenfunction 测量粒子的动量有准确值 $\boldsymbol{p}_0$ 的本征函数 $\psi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{x})$ 满足

$$\hat{\boldsymbol{p}}\psi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{p}_0\psi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{x})$$

注意到在坐标表象，$\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{i}\nabla$，则解得

$$\psi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{x})=A\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{x}}$$

本征值 $\boldsymbol{p}_0$ 可连续变化，形成连续谱，按连续谱对应的本征函数的规格化条件

$$\int\psi_{\boldsymbol{p}_0}^*(\boldsymbol{x})\,\psi_{\boldsymbol{p}'_0}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x=\delta(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p}'_0)$$

得 $A=(2\pi\hbar)^{-3/2}$。

共同的本征函数 simultaneous eigenfunctions

如果力学量算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，$[\hat{A},\hat{B}]=0$，则它们有共同的本征函数系。

若 $\hat{A}\psi_n=a_n\psi_n$，而 a_n 不简并，对应 a_n 只有一个 ψ_n。则因 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易，有

$$\hat{A}\hat{B}\psi_n=\hat{B}\hat{A}\psi_n=a_n\hat{B}\psi_n$$

这意味 $\hat{B}\psi_n$ 也是 $\hat{A}$ 算符对应 a_n 的本征函数，所以 $\hat{B}\psi_n$ 和 ψ_n 只能相差一个常数

$$\hat{B}\psi_n=b_n\psi_n$$

所以 ψ_n 是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 共同的本征函数。

若 $\hat{A}\psi_{ni}=a_n\psi_{ni}$，$i=1,2,\cdots,f$，式中的 f 个

ψ_{ni}是线性独立的，设是相互正交的。由于 ψ_{ni} 的线性叠加仍是 $\hat{A}$ 的对应 a_n 的本征函数，所以 a_n 对应一个 f 维的本征子空间 L_f，可以重新选择一组 L_f 空间的正交基，使它们也是 $\hat{B}$ 的本征函数

$$\varphi_{nm}=\sum_i C_i^{(m)}\psi_{ni},\ \hat{B}\varphi_{nm}=b_m\varphi_{nm}$$

$\hat{B}$的本征方程可写成矩阵的本征方程形式：

$$\begin{vmatrix} B_{11}-b_m & B_{12} & B_{13} & \cdots & B_{1f} \\ B_{21} & B_{22}-b_m & B_{23} & \cdots & B_{2f} \\ \vdots & & & & \\ B_{f1} & B_{f2} & & & B_{ff}-b_m \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} C_1^{(m)} \\ C_2^{(m)} \\ \vdots \\ C_f^{(m)} \end{vmatrix}=0$$

其中矩阵元 $B_{ij}=\int\psi_{ni}^*\hat{B}\psi_{nj}\mathrm{d}^3x$，由系数矩阵的行列式为零定本征值 b_m，$m=1,2,\cdots,f$，将 b_m 代回方程组，解得相应的一组 $C_i^{(m)}$，$i=1,2,\cdots,f$。则 φ_{nm}就是$\hat{A}$和$\hat{B}$共同的本征函数。参见“算符的矩阵表示”。

完备算符集 complete set of commuting operators 若$\hat{c}=(\hat{c}_1,\hat{c}_2,\cdots,\hat{c}_l)$为一组两两相互对易的力学量算符，如果它们在量子态空间的共同本征矢量完全不简并，则称$\hat{C}$为量子态空间的完备算符集（力学量的完全集合）。例如氢原子的$\hat{H}$、$\hat{L}^2$、$\hat{L}_3$在无自旋的轨道运动态空间构成完备算符集。考虑自旋态，则$\hat{H}$、$\hat{L}^2$、$\hat{L}_3$、$\hat{S}_3$或$\hat{H}$、$\hat{L}^2$、$\hat{J}^2$、$\hat{J}_3$是完备算符集，其中$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$。由此可见完备算符集的定义和空间相联系。

位力定理 virial theorem 设粒子处于势场 $V(\boldsymbol{r})$中，哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2+V(\boldsymbol{r})$$

那么对于束缚定态，有

$$2\langle\hat{T}\rangle=\langle\boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{1}$$

其中 T 是粒子的动能，V 是粒子的势能，$\langle\cdots\rangle$表示求量子力学平均值。这就是位力定理。如果粒子的势场 $V(x,y,z)$是 x、y、z 的 n 次齐次函数，那么位力定理可表示为

$$2\langle\hat{T}\rangle=n\langle V\rangle$$

式(1)可如下证明：

$$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t}=\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

令$\hat{A}=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$，由于对束缚定态平均值$\langle\hat{A}\rangle$不随时间而变，$\frac{\mathrm{d}\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{d}t}=0$。通过计算$[\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]$，不难得到式(1)。参见“平均值的演化”。

费曼-海尔曼定理 Feynman-Hellmann theorem 设体系的哈密顿量 H 中含有某参量 λ，E_n 为$\hat{H}$的离散本征值，相应的归一化本征函数（束缚态）为 ψ_n（n 为一组量子数），则

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}=\langle\frac{\partial\hat{H}}{\partial\lambda}\rangle_n$$

其中$\langle\cdots\rangle$表示求平均，这就是费曼-海尔曼定理。这个定理涉及能量本征值及各种力学量平均值随参数变化的规律。如果体系的能量本征值已求出，借助于费曼-海尔曼定理可以得出关于各种力学量平均值的许多信息，而不必再利用波函数去进行繁琐的计算。

该定理可如下证明：

由于哈密顿算符含实参量 λ，则束缚态的能级和态矢量也是 λ 的函数，即有

$$\hat{H}(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle=E_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle,$$
$$\langle\psi_n(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle=1$$

由本征值方程和归一化条件，可得

$$E_n(\lambda)=\langle\psi_n(\lambda)|\hat{H}(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle$$

将上式对 λ 求偏导，得

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial\lambda}=\langle\psi_n(\lambda)|\frac{\partial\hat{H}(\lambda)}{\partial\lambda}|\psi_n(\lambda)\rangle+\frac{\partial\langle\psi_n(\lambda)|}{\partial\lambda}|\hat{H}(\lambda)|\psi_n(\lambda)\rangle$$

$$+\langle \psi_n(\lambda) | \hat{H}(\lambda) \frac{\partial}{\partial \lambda} | \psi_n(\lambda) \rangle$$

由本征值方程及其厄米共轭方程并考虑归一化条件,可知上式右方后二项之和为零。得证。

量子态的表象 representation of quantum state 由于力学量算符$\hat{A}$的本征函数系$\psi_n(\boldsymbol{x})$,$n=1,2,\cdots$,是完备的,任意的量子态$\psi(\boldsymbol{x})$可按ψ_n展开

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_n C_n \psi_n(\boldsymbol{x})$$

$$C_n = \int \psi_n^*(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x = \langle \psi_n | \psi \rangle$$

如果约定用$\hat{A}$的本征函数系ψ_n作为态空间的基矢组,则$\psi(\boldsymbol{x})$和一套展开系数C_n相对应

$$\psi(\boldsymbol{x}) \leftrightarrow \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \end{vmatrix}$$

以上展开系数的一列矩阵称为量子态在A表象的表示(广义波函数)。由于C_n是在$\psi(\boldsymbol{x})$态测量A得a_n的概率幅,所以量子态ψ在A表象的表示对应到力学量A的测量。由于坐标算符$\hat{\boldsymbol{x}}$的本征函数$\psi_{\boldsymbol{x}_0}(\boldsymbol{x}) = \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0)$,本征值$\boldsymbol{x}_0$连续变化,于是

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \int \mathrm{d}^3 x_0 C(\boldsymbol{x}_0) \delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0)$$

$$C(\boldsymbol{x}_0) = \psi(\boldsymbol{x}_0)$$

只是对于连续的$\boldsymbol{x}_0$,$\psi(\boldsymbol{x}_0)$不可列,就以$\psi(\boldsymbol{x})$代表$\boldsymbol{x}$行的展开系数,所以通常的波函数$\psi(\boldsymbol{x})$只是广义波函数的一种特殊情形。由于动量算符$\hat{\boldsymbol{p}}$的本征函数

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x}\right],$$

所以$\psi(\boldsymbol{x})$的傅里叶积分展开系数$\Phi(\boldsymbol{p})$就是动量表象的广义波函数:

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \int \Phi(\boldsymbol{p}) \frac{\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{d}^3 p$$

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = \int \frac{\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x$$

算符的矩阵表示 matrix representation of operator 当对量子态采用A表象,表象基满足

$$\hat{A}\psi_n(\boldsymbol{x}) = a_n \psi_n(\boldsymbol{x})$$

设$\hat{A}$的本征值a_n取离散值,则力学量算符$\hat{B}$被表示成为一个矩阵

$$\begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1m} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2m} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nm} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{vmatrix} \quad (1)$$

其中矩阵元

$$B_{nm} = \int \psi_n^*(\boldsymbol{x}) \hat{B} \psi_m(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x$$

证明如下:

设$\hat{B}\psi(\boldsymbol{x}) = \varphi(\boldsymbol{x})$,分别将$\psi$和$\varphi$按$\hat{A}$的本征函数展开

$$\psi = \sum_m C_m \psi_m \quad \varphi = \sum_n d_n \psi_n$$

则
$$\hat{B}\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_m C_m \hat{B}\psi_m = \sum_n \sum_m B_{nm} \cdot C_m \psi_n = \sum_n d_n \psi_n$$

$$d_n = \sum_m B_{nm} C_m,\ n = 1,2,3,\cdots$$

即

$$\begin{vmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \\ \vdots \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1m} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2m} & \cdots \\ \vdots & & & & \\ B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nm} & \cdots \\ \vdots & & & & \end{vmatrix} \begin{vmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_m \\ \vdots \end{vmatrix} \quad (2)$$

所以$\varphi(\boldsymbol{x}) = \hat{B}\psi(\boldsymbol{x})$由矩阵运算式(2)代替,$\hat{B}\psi$在$A$表象中由$B$矩阵(1)对$\psi$的广义波函数即一列矩阵$(C_n)$作用。$\hat{B}$的本征值方程$\hat{B}\psi = b\psi$在$A$表象中成为$B$矩阵(1)的本征值方程

$$(B_{nm})(C_m) = b(C_n)$$

含时薛定谔方程在A表象中成为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{vmatrix}C_1\\C_2\\\vdots\\C_n\\\vdots\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}H_{nm}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}C_1\\C_2\\\vdots\\C_m\\\vdots\end{vmatrix}$$

线谐振子的代数解　algebra solution of linear harmonic oscillator　线谐振子的哈密顿算符

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}[\hat{p}^2+m^2\omega^2\hat{x}^2]$$

引入湮没和产生算符$\hat{a}$和$\hat{a}^+$代替$\hat{x}$和$\hat{p}$,

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}+i\hat{p}),$$

$$\hat{a}^+=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}-i\hat{p}),$$

则其逆变换为

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^++\hat{a}),$$

$$\hat{p}=i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a}^+-\hat{a})$$

由量子条件$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$,得到$[\hat{a},\hat{a}^+]=1$。

将$\hat{x}$和$\hat{p}$的表示式代入$\hat{H}$,并利用$[\hat{a},\hat{a}^+]=1$,得到

$$\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2})$$

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{H},\hat{a}]=-\hbar\omega\hat{a}\\&[\hat{H},\hat{a}^+]=\hbar\omega\hat{a}^+\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

设$\hat{H}$的本征值为$\lambda\hbar\omega$,相应的本征矢为$|\lambda\rangle$,则有

$$\hat{H}|\lambda\rangle=\lambda\hbar\omega|\lambda\rangle,$$

由于一维束缚态不简并,λ和$|\lambda\rangle$一对一对应。根据式(1),得到

$$\hat{H}\hat{a}|\lambda\rangle=(\hat{a}\hat{H}-\hbar\omega\hat{a})|\lambda\rangle=(\lambda-1)\hbar\omega\hat{a}|\lambda\rangle$$

$$\hat{H}\hat{a}^+|\lambda\rangle=(\lambda+1)\hbar\omega\hat{a}^+|\lambda\rangle$$

可见$\hat{a}|\lambda\rangle$和$\hat{a}^+|\lambda\rangle$也是$\hat{H}$的本征矢,分别对应本征值$(\lambda-1)\hbar\omega$和$(\lambda+1)\hbar\omega$,除非出现$\hat{a}|\lambda\rangle=0$的例外。所以$\hat{a}|\lambda\rangle$和$\hat{a}^+|\lambda\rangle$分别与$|\lambda-1\rangle$和$|\lambda+1\rangle$只差一个常数因子$\hat{a}|\lambda\rangle=C(\lambda)|\lambda-1\rangle$;$\hat{a}^+|\lambda\rangle=d(\lambda)|\lambda+1\rangle$

根据厄米算符的定义,不难证明厄米算符平方$\hat{Q}^2$的对角矩阵元是非负的。设表象基的完备性条件为

$1=\sum_l|l\rangle\langle l|$,则

$$\langle l'|\hat{Q}^2|l'\rangle=\sum_l\langle l'|\hat{Q}|l\rangle\langle l|\hat{Q}|l'\rangle$$

$$=\sum_l|\langle l'|\hat{Q}|l\rangle|^2\geqslant 0$$

由于线谐振子的哈密顿算符包含二项厄米算符的平方和,其对角矩阵元是非负的。采用本表象表示,$\hat{H}$的对角矩阵元就是本征值$\lambda\hbar\omega$,所以$\lambda\geqslant 0$。

逐次用$\hat{a}$使本征值递降1,将得到最小本征值λ_m,$\hat{a}|\lambda_m\rangle=0$,其模

$$\langle\lambda_m|\hat{a}^+\hat{a}|\lambda_m\rangle=0$$

考虑到$|\lambda_m\rangle$是$\hat{H}$的本征态,则

$$\langle\lambda_m|\hat{H}|\lambda_m\rangle=\lambda_m\hbar\omega=\langle\lambda_m|(\hat{a}^+\hat{a}+\frac{1}{2})\hbar\omega|\lambda_m\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

得到$\lambda_m=\frac{1}{2}$,$\lambda=(\frac{1}{2}+n)$,改记$|\lambda\rangle$为$|n\rangle$则有

$$\hat{H}|n\rangle=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle,\qquad(2)$$

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle,\hat{n}=\hat{a}^+\hat{a}\qquad(3)$$

在$|n\rangle$态,有n个能量为$\hbar\omega$的量子,$\hat{n}$为量子的粒子数算符。

由于改记$|\lambda\rangle$为$|n\rangle$,则

$$\hat{a}|n\rangle=C_n|n-1\rangle,$$

$$\hat{a}^+|n\rangle=d_n|n+1\rangle\qquad(4)$$

考虑到$\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle=n=\langle n-1|C_n^*C_n|n-1\rangle=|C_n|^2$

则有 $C_n=\sqrt{n}$。又由于

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle=|d_n|^2=\langle n|\hat{a}^+\hat{a}+1|n\rangle=n+1$$

则有 $d_n=\sqrt{n+1}$

由于力学量 $A(x,p)$是 x,p 的函数,经量子化后,$A\to\hat{A}(\hat{x},\hat{p})\to\hat{A}(\hat{a},\hat{a}^+)$。

δ函数 δ function 狄拉克引进的δ函数定义为

$$\delta(x)=\begin{cases}0\quad, & x\neq 0\\ \infty\quad, & x=0\end{cases}$$

并满足 $\int_a^b\delta(x)\mathrm{d}x=1$, $a<0<b$。$\delta(x)$的定义在广义函数中才得到确认。量子力学中使用 $\delta(x)$,理论计算和实验结果符合,说明 $\delta(x)$的定义是科学的。

$\delta(x)$有下列性质:

(1) $\int_a^b f(x)\delta(x)\mathrm{d}x=f(0)$, $a<0<b$

(2) $\int_a^b f(x)\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\delta(x)\mathrm{d}x=(-1)^n\cdot\left[\dfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}f(x)\right]_{x=0}$

(3) $x\delta(x)=0$, $x\delta(x-x')=x'\delta(x-x')$

(4) $\delta(-x)=\delta(x)$, $\delta'(-x)=-\delta'(x)$

$\delta(x)$函数的几种常用表示式:

(1) $\delta(x)=\lim\limits_{\alpha\to 0^+}\dfrac{1}{\pi}\dfrac{\alpha}{\alpha^2+x^2}$

(2) $\delta(x)=\dfrac{1}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty}e^{ikx}\mathrm{d}k$

(3) $\delta(x)=\dfrac{1}{\pi}\lim\limits_{k\to\infty}\dfrac{\sin kx}{x}$

幺正变换 unitary transformation 幺正算符 $\hat{U}$满足 $\hat{U}^+\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^+=1$,由幺正算符 $\hat{U}$对态矢量作用导致的变换称为幺正变换。当态空间作幺正变换

$$|\psi\rangle_n=\hat{U}|\psi\rangle,\ |\varphi\rangle_n=\hat{U}|\varphi\rangle$$

算符 $\hat{p}$也要作相应的变换

$$\hat{p}_n=\hat{U}\hat{p}\hat{U}^+$$

在幺正变换下,态矢量的内积不变

$${}_n\langle\varphi|\psi\rangle_n=\langle\varphi|\hat{U}^+\hat{U}|\psi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle$$

在幺正变换下,算符之间的关系和算符的性质都不变:

$$\hat{D}=\hat{A}\hat{B}+\hat{C}\longrightarrow\hat{D}_n=\hat{A}_n\hat{B}_n+\hat{C}_n$$

$$\hat{p}^+=\hat{p}\longrightarrow\hat{p}_n^+=\hat{p}_n$$

因此,作幺正变换不影响体系的物理性质,用 $|\psi\rangle$、$\hat{p}$描写系统和用 $|\psi\rangle_n$、$\hat{p}_n$描写系统是完全等价的。

对于幺正变换有二种观点:主动的观点认为态矢量发生变换,态空间发生转动;被动的观点认为态矢量不变,而态空间的正交归一基矢组发生了相应的转动,从 A 表象变到 B 表象,而同一态矢量在不同表象的"坐标"(广义波函数)之间发生幺正变换。同一算符 $\hat{p}$在 A、B 表象的矩阵表示以幺正变换相联系。

设 A、B 表象基分别为 $|A_i\rangle(i=1,2,3,\cdots)$和 $|Bj\rangle(j=1,2,3,\cdots)$,则利用二套表象基的完备性条件得到:

$$|A_i\rangle=\sum_j|B_j\rangle\langle B_j|A_i\rangle=\sum_j|B_j\rangle U_{ji}$$

$$|B_j\rangle=\sum_i|A_i\rangle\langle A_i|B_j\rangle=\sum_i|A_i\rangle(U^+)_{ij}$$

以系数 $\langle B_j|A_i\rangle=U_{ji}$为矩阵元组成的矩阵相应一个算符 $\hat{U}$,则 $\langle A_i|B_j\rangle=\langle B_j|A_i\rangle^*=U_{ji}^*=(U^+)_{ij}$, U^+矩阵相应 $\hat{U}^+$算符。由表象基的正交归一性,得到:

$$\delta_{j'j}=\langle B_{j'}|B_j\rangle=\sum_i\langle B_{j'}|A_i\rangle\langle A_i|B_j\rangle=(UU^+)_{j'j}$$

$$\delta_{i'i}=\langle A_{i'}|A_i\rangle=\sum_j\langle A_{i'}|B_j\rangle\langle B_j|A_i\rangle=(U^+U)_{i'i}$$

即 $\hat{U}\hat{U}^+=1$, $\hat{U}^+\hat{U}=1$

所以从 A 到 B 表象的变换是幺正变换,且有

$$\langle B_j|\psi\rangle=\langle B_j|\sum_i|A_i\rangle\langle A_i|\psi\rangle=\sum_i U_{ji}\langle A_i|\psi\rangle$$

$\langle B_j | \hat{p} | B_{j'} \rangle = (\sum_i \langle B_j | A_i \rangle \langle A_i |) \hat{p} (\sum_{i'} | A_{i'} \rangle \langle A_{i'} | B_{j'} \rangle) = \sum_i \sum_{i'} U_{ji} \langle A_i | \hat{p} | A_{i'} \rangle U^+_{ij'}$

即 $\hat{p}^B = U p^A U^+$ 或 $\hat{p}_n = \hat{U} \hat{p} \hat{U}^+$

薛定谔绘景 Schrödinger picture 幺正变换导致态空间的转动而不影响物理实质。对于含时的幺正变换，态空间的转动依赖时间。对于不同的含时幺正变换，量子态的演变呈现不同的图像。

对于封闭的系统，哈密顿量不含时间。系统的广义坐标和广义动量作为独立变量也不含时间。若认为代表力学量的算符 $\hat{p}$ 都不随时间而变，系统的一切变化包含在量子态随时间的演变中。以这种观点描绘量子系统的演化，所得到的图像称为薛定谔绘景。在此绘景中，运动方程为

$$\frac{\partial \hat{p}}{\partial t} = 0$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | t \rangle = \hat{H} | t \rangle$$

其中 $| t \rangle$ 代表 t 时刻的量子态，而

$$\frac{\partial}{\partial t} | t \rangle = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{| t + \Delta t \rangle - | t \rangle}{\Delta t}$$

由于 $\hat{H}$ 不含 t，有定态解

$$| j, t \rangle = | j \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t},$$

$| j \rangle$ 满足定态方程

$$\hat{H} | j \rangle = E_j | j \rangle, j = 1, 2, 3, \cdots$$

变换算符 transformation operator 把系统 t_0 时刻的态 $| t_0 \rangle$ 变换到 t 时刻的态 $| t \rangle$ 的变换算符 $\hat{U}(t, t_0)$ 定义为

$$| t \rangle = \hat{U}(t, t_0) | t_0 \rangle \qquad (1)$$

其逆算符

$$\hat{U}^{-1}(t, t_0) = \hat{U}(t_0, t)$$

变换算符有性质：

(1) $\hat{U}(t, t) = \hat{U}(t_0, t_0) = 1$

(2) $\hat{U}(t, t_0) = \hat{U}(t, t') \hat{U}(t', t_0)$

(3) $\hat{U}(t, t_0)$ 是幺正算符

将式(1)代入薛定谔绘景的运动方程，得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0)$$

解得

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)}$$

格林函数 Green function 格林函数就是变换算符在 $\boldsymbol{x}$ 表象的矩阵元。对变换算符的定义式 $| t \rangle = \hat{U}(t, t_0) | t_0 \rangle$ 取 $\boldsymbol{x}$ 表象

$$\langle \boldsymbol{x} | t \rangle = \langle \boldsymbol{x} | \hat{U}(t, t_0) | t_0 \rangle$$

利用 $\boldsymbol{x}$ 表象的完备性条件 $\int d^3 x' | \boldsymbol{x}' \rangle \langle \boldsymbol{x}' | = 1$，则有

$$\langle \boldsymbol{x} | t \rangle = \int d^3 x' \langle \boldsymbol{x} | \hat{U}(t, t_0) | \boldsymbol{x}' \rangle \langle \boldsymbol{x}' | t_0 \rangle$$

记 $\langle \boldsymbol{x} | t \rangle = \psi(\boldsymbol{x}, t)$；$\langle \boldsymbol{x}' | t_0 \rangle = \psi(\boldsymbol{x}', t_0)$；格林函数 $G(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}' t_0) = \langle \boldsymbol{x} | \hat{U}(t, t_0) | \boldsymbol{x}' \rangle$，以上积分式为

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = \int d^3 x' G(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}' t_0) \psi(\boldsymbol{x}' t_0) \qquad (1)$$

上式表明格林函数起着传播的作用。t_0 时 $\boldsymbol{x}'$ 处 $d^3 x'$ 范围内的波场 $\psi(\boldsymbol{x}' t_0) d^3 x'$，经传播对 t 时 $\boldsymbol{x}$ 处波函数 $\psi(\boldsymbol{x}t)$ 的贡献为

$$d^3 x' G(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}' t_0) \psi(\boldsymbol{x}' t_0)$$

(1)式中对 $\boldsymbol{x}'$ 的积分，表示 t_0 时不同 $\boldsymbol{x}'$ 处的波场经传播都对 $\psi(\boldsymbol{x}t)$ 有参与叠加的贡献。如果格林函数 $G(\boldsymbol{x}t, \boldsymbol{x}' t_0)$ 已知，由 t_0 时的波函数 $\psi(\boldsymbol{x}' t_0)$ 按式(1)积分就得到 $\psi(\boldsymbol{x}t)$。

海森伯绘景 Heisenberg picture 以变换算符的逆算符 $\hat{U}^{-1}(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)}$ 作幺正变换，得到海森伯绘景

$$| t \rangle_H = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)} | t \rangle = | t_0 \rangle$$

$$\hat{p}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)} \hat{p} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t - t_0)}$$

由于希尔伯特空间中基矢组的“转动”与态的演变同步，不能觉察态的变化。系统的演化体现在力学量算符的演化中。

转变绘景的可行性在于态矢量和算符在量子力学中不是直接可观察的;而幺正变换不改变内积,所以可与实验作比较的力学量的期望值在两种绘景中相同

$$\langle t|\hat{p}|t\rangle=\langle t_0|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}\hat{p}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|t_0\rangle$$

$$={}_H\langle t|\hat{p}_H|t\rangle_H$$

在 $t=t_0$ 时刻,薛定谔与海森伯两种绘景重合。

海森伯绘景中的运动方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle_H=0$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{p}_H=[\hat{p}_H,\hat{H}_H],\ \hat{H}_H=\hat{H}$$

相互作用绘景 interaction picture 若系统的哈密顿算符包含二部分:$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_i$,$\hat{H}_0$ 为自由部分,$\hat{H}_i$ 为相互作用部分。而和 $\hat{H}_0$ 相应的变换算符:

$$\hat{R}=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t_0)}$$

以 $\hat{R}^+$ 作幺正变换:

$$|t\rangle_I=\hat{R}^+(t,t_0)|t\rangle$$

$$\hat{p}_I(t)=\hat{R}^+\hat{p}\hat{R}$$

$|t\rangle_I$ 和 $\hat{p}_I(t)$ 是相互作用绘景中态矢量和算符,二者都随时间变化。态矢 $|t\rangle$ 在希尔伯特空间的演化,仅部分地由幺正变换 $\hat{R}^+$ 导致的态空间的相应“转动”所抵消,净效果是 $|t\rangle_I$。相互作用绘景中的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|t\rangle_I=\hat{H}_{iI}|t\rangle_I$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{p}_I(t)=[\hat{p}_I(t),\hat{H}_{0I}]$$

其中 $\hat{H}_{0I}=\hat{H}_0$,$\hat{H}_{iI}=\hat{R}^+\hat{H}_i\hat{R}$。在相互作用绘景中,$\hat{H}_{iI}$ 控制 $|t\rangle_I$ 的演化;$\hat{H}_{0I}$ 控制 $\hat{p}_I(t)$ 的演化。该绘景适宜研究有相互作用的系统,例如粒子和靶的相互作用引起的散射问题。当粒子进入 $\hat{H}_i=0$ 的地方时,态 $|t\rangle_I$ 不再变化。

升算符与降算符 raising and lowering operator 对于线性谐振子,能级 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$,相应的本征态 ψ_n 是有 n 颗量子 $\hbar\omega$ 的状态。升、降算符对 ψ_n 的作用结果分别生成量子数 n 增加和降低 1 的状态:

$$\left.\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{d}{d\xi}\right)\psi_n(\xi)&=\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(\xi)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{d}{d\xi}\right)\psi_n(\xi)&=\sqrt{n}\,\psi_{n-1}(\xi)\end{aligned}\right\}\quad(1)$$

其中 $\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$,$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi\mp\frac{d}{d\xi}\right)$ 分别为升、降算符。用态矢 $|n\rangle$ 代替 $\psi_n(\xi)$,并分别用 $\hat{b}^+$ 和 $\hat{b}$ 代表对态矢作用的升、降算符,则式(1)成为

$$\left.\begin{aligned}\hat{b}^+|n\rangle&=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle\\ \hat{b}|n\rangle&=\sqrt{n}\,|n-1\rangle\end{aligned}\right\}\quad(2)$$

应用式(2),得到

$$\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle=\sqrt{n}\hat{b}^+|n-1\rangle=n|n\rangle$$

$$\hat{b}\hat{b}^+|n\rangle=(n+1)|n\rangle$$

$$[\hat{b},\hat{b}^+]=1$$

数算符(number operator)$\hat{n}=\hat{b}^+\hat{b}$。在角动量理论中,升、降算符 $\hat{J}_\pm=\hat{J}_1\pm i\hat{J}_2$,使 $\hat{J}_3$ 本征态的量子数 m 产生升降。

密度矩阵 density matrix 密度矩阵是统计算符(密度算符)的矩阵表示。统计算符则是用来描述混合态的。设混合态由 $|i\rangle$ 的集合和 $|i\rangle$ 态出现的概率 W_i 的集合构成,则统计算符:

$$\hat{\rho}=\sum_i|i\rangle Wi\langle i|$$

在纯态 $|i\rangle$ 测量力学量 B 得 b_n 的概率为 $\langle b_n|i\rangle\langle i|b_n\rangle$,其中 $|b_n\rangle$ 是 $\hat{B}$ 的本征矢量。在 $|i\rangle$ 态测 B 的平均值为 $\langle i|\hat{B}|i\rangle$。考虑到 $|i\rangle$ 在混态中出现的概率为 W_i,则对于混合态测 B 得 b_n 的概率为

$$P_n=\sum_i W_i\langle b_n|i\rangle\langle i|b_n\rangle$$

$$=\langle b_n|\hat{\rho}|b_n\rangle$$

而在混合态测 B 的平均值为

$$\langle B\rangle=\sum_i W_i\langle i|\hat{B}|i\rangle$$

设态空间取定正交归一的完备基矢组 $|j\rangle$，$j=1,2,3,\cdots$，则有

$$\sum_j |j\rangle\langle j|=1,\langle j|k\rangle=\delta_{jk}$$

而 $\hat{\rho}$ 和 $\hat{B}$ 的矩阵元分别是 $\langle j|\hat{\rho}|k\rangle=\sum_i\langle j|i\rangle W_i\langle i|k\rangle$ 和 $\langle j|\hat{B}|k\rangle$。利用基矢组的完备性条件，力学量 B 对混合态的平均值

$$\begin{aligned}\langle B\rangle&=\sum_i W_i\langle i|\hat{B}|i\rangle\\&=\sum_i\sum_j\sum_k W_i\langle i|j\rangle\\&\quad\cdot\langle j|\hat{B}|k\rangle\langle k|i\rangle\\&=\sum_j\sum_k\langle j|\hat{B}|k\rangle\langle k|\\&\quad\cdot\left\{\sum_i|i\rangle W_i\langle i|\right\}|j\rangle\\&=\sum_j\sum_k\langle j|\hat{B}|k\rangle\langle k|\hat{\rho}|j\rangle\\&=\mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{\rho}\end{aligned}$$

其中 Tr 是矩阵求迹符号。在求迹号下，算符可交换；且 $\mathrm{Tr}\,\hat{B}\hat{\rho}$ 与选何种表象无关。

刘维尔方程 Liouville equation 由系统的定态所构成的混合态的随时间演化规律，由统计算符 $\hat{\rho}$ 的运动方程——刘维尔方程（也称诺依曼方程）描述。

假定混合态一旦制备以后，处于 $|j\rangle$ 纯态的系统数 n_j 固定不变，时间演化完全由系统本身的固有动力学规律所决定。设系统的哈密顿算符是 $\hat{H}$，其态矢量 $|j\rangle$ 满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|j\rangle=\hat{H}|j\rangle,j=1,2,3,\cdots$$

将
$$\hat{\rho}=\sum_j|j\rangle W_j\langle j|$$

对 t 求导，并应用薛定谔方程及其厄米共厄方程，注意到 W_j 因 n_j 不变也不随 t 改变，得到刘维尔方程

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=[\hat{H},\hat{\rho}]$$

如果 $\hat{\rho}$ 不再随时间演变，$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=0$，系统到达热力学平衡态。这时，$[\hat{H},\hat{\rho}]=0$，即 $\hat{\rho}$ 应是 $\hat{H}$ 以及可和 $\hat{H}$ 对易的力学量算符的函数。统计物理证明平衡态的统计算符：

正则系综：$\hat{\rho}=e^{-\beta\hat{H}}/\mathrm{Tr}e^{-\beta\hat{H}}$

巨正则系综：

$$\hat{\rho}=e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}/\mathrm{Tr}e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}$$

式中 $\hat{N}$ 是粒子数算符，$\beta=\frac{1}{kT}$，k 是玻尔兹曼常数，T 是绝对温度，μ 是化学势。

空间平移算符 space displacement operator 设粒子作一维运动，位形空间的平移变换：$x\to x+a$，记 $T_a x=x+a$。设粒子的波函数为 $\psi(x)$，它决定了 N 次测量位置实验中落在 x 处的粒子分布密度 $\rho=N|\psi(x)|^2$，若按位形空间的平移变换 T_a，把 x 处的粒子平移到 $x+a$ 处，则平移后 x 处的波函数 $\psi'(x)=\hat{T}_a\psi(x)$ 等于平移前 $x-a$ 处的波函数

$$\begin{aligned}\psi'(x)&=\hat{T}_a\psi(x)=\psi(x-a)\\&=\left[1+(-a)\frac{d}{dx}+\frac{(-a)^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2}+\cdots\right]\psi(x)\end{aligned}$$

$$\psi'(x)=e^{-a\frac{d}{dx}}\psi(x)=e^{\frac{1}{i\hbar}a\hat{p}}\psi(x)$$

由此得到

$$\hat{T}_a=e^{\frac{1}{i\hbar}a\hat{p}}$$

其中 $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ 是一维的动量算符。同样可得粒子作三维运动的平移算符

$$\hat{T}_{\boldsymbol{a}}=e^{\frac{1}{i\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}$$

空间转动算符 space rotation operator 先考虑绕 Z 轴的定轴转动，设转过 α 的转动操作将 φ 处的粒子带到 $\varphi+\alpha$ 处，则转动后 φ 处的粒子是转动前 $\varphi-\alpha$ 处的粒子。于是有：

$$\hat{R}(z_0,\alpha)\psi(\varphi)=\psi'(\varphi)=\psi(\varphi-\alpha)$$

式中 z_0 是 z 轴的单位矢量，ψ 是转动前的波

函数，ψ'是转动后的波函数。将 $\psi(\varphi-\alpha)$在 φ 点作幂级数展开，利用$\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}$，得到

$$\hat{R}(z_0,\alpha)=e^{\frac{1}{i\hbar}\alpha\hat{L}_z}。$$

绕任意单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 转过 α 的定轴转动算符

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)=e^{\frac{1}{i\hbar}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}$$

式中$\hat{\boldsymbol{L}}$是轨道角动量算符。

将位形空间的转动映射到自旋态空间，相应的转动算符

$$\hat{R}_s(\boldsymbol{n},\alpha)=e^{\frac{1}{i\hbar}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}}}$$

式中$\hat{\boldsymbol{S}}$是自旋角动量算符。既有轨道运动又有自旋运动的量子态空间，转动算符

$$\hat{R}(\boldsymbol{n},\alpha)=e^{\frac{1}{i\hbar}\alpha\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{J}}}$$

其中$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$是轨道角动量$\hat{\boldsymbol{L}}$和自旋角动量$\hat{\boldsymbol{S}}$的合成。

空间反演算符 space inversion operator 对于无自旋的粒子，其轨道运动态的波函数为 $\psi(\boldsymbol{x})$。对于空间反演变换 $\boldsymbol{x}\to P\boldsymbol{x}=-\boldsymbol{x}$，若相应地将 $\boldsymbol{x}$ 处的粒子搬到 $-\boldsymbol{x}$ 处，则空间反演变换后 $\boldsymbol{x}$ 处的波函数，其实是变换前 $-\boldsymbol{x}$ 处的波函数。由上述映射可得到轨道运动态空间的空间反演算符$\hat{P}$

$$\hat{P}\psi(\boldsymbol{x})=\psi'(\boldsymbol{x})=\psi(-\boldsymbol{x}),\hat{P}^2=1$$

由于空间反演变换后不影响波函数的归一化，$\hat{P}$是幺正算符，$\hat{P}^+\hat{P}=\hat{P}\hat{P}^+=1$，结合$\hat{P}^2=1$，有$\hat{P}=\hat{P}^+$，即$\hat{P}$是厄米算符有实的本征值。

设$\hat{P}$的本征函数为 $\varphi(\boldsymbol{x})$，本征值为 λ，则

$$\hat{P}\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi(-\boldsymbol{x})=\lambda\varphi(\boldsymbol{x})$$

$$\hat{P}^2\varphi(\boldsymbol{x})=\varphi(\boldsymbol{x})=\lambda^2\varphi(\boldsymbol{x})$$

所以 $\lambda^2=1$，$\lambda=\pm1$，即 $\varphi(\boldsymbol{x})$是奇或偶函数。

若 $V(\boldsymbol{x})=V(-\boldsymbol{x})$，则$[\hat{P},\hat{H}]=0$，$\hat{P}$和$\hat{H}$有共同的本征函数，那么$\hat{H}$的本征函数也有确定的宇称 1 或 -1，即$\hat{H}$的本征函数是偶函数或奇函数。无自旋粒子轨道运动态的宇称叫做轨道宇称。

对于自旋为 S 的单粒子，除了轨道运动外还有内禀运动。波函数有 $2S+1$ 个分量：

$$\psi(\boldsymbol{x})=\begin{vmatrix}\psi_S(\boldsymbol{x})\\ \psi_{S-1}(\boldsymbol{x})\\ \vdots\\ \psi_{m_S}(\boldsymbol{x})\\ \vdots\\ \psi_{-S}(\boldsymbol{x})\end{vmatrix}$$

在空间反演变换下，除了 ψ 的各个分量 $\psi_{m_s}(\boldsymbol{x})$ 中的 $\boldsymbol{x}\to-\boldsymbol{x}$ 之外，$\psi(\boldsymbol{x})$也要作变换，由此引入内禀宇称为：

(1)若 ψ 是矢量($S=1$,3 分量)

$$\psi(\boldsymbol{x})\longrightarrow-\psi(-\boldsymbol{x})=\xi\psi(-\boldsymbol{x}),\xi=-1$$

(2)若 ψ 是赝矢量($S=1$,3 分量)

$$\psi(\boldsymbol{x})\longrightarrow\psi(-\boldsymbol{x})=\xi\psi(-\boldsymbol{x}),\xi=1$$

(3)若 ψ 是标量($S=0$,1 分量)

$$\psi(\boldsymbol{x})\longrightarrow\psi(-\boldsymbol{x})=\xi\psi(-\boldsymbol{x}),\xi=1$$

(4)若 ψ 是赝标量($S=0$,1 分量)

$$\psi(\boldsymbol{x})\longrightarrow-\psi(-\boldsymbol{x})=\xi\psi(-\boldsymbol{x}),\xi=-1$$

若系统有空间反演对称性

$\psi_{m_S}(-\boldsymbol{x})=\pi\psi_{m_S}(\boldsymbol{x})$，$\pi$ 为轨道宇称；

$$\hat{p}\psi(\boldsymbol{x})=\xi\psi(-\boldsymbol{x})=\xi\pi\psi(\boldsymbol{x})$$

总宇称 $p=\xi\pi$

量子力学的路径积分 path integrals in quantum mechanics 量子力学的路径积分表示是狄拉克在 20 世纪 30 年代初期提出的；费曼(Feynman)在 40 年代发展了这个方法，现已应用到量子理论的各个领域。费曼首先用这个方法为量子电动力学建立了一个自洽的明显相对论不变的微扰论。规范场的量子化也是借助路径积分完成的。

在量子力学中，知道了波函数 $\psi(\boldsymbol{x},t)$，就可求得所有力学量的测量概率幅。变换算符在坐标(q)表象的矩阵元(格林函数)以积分形式联系了两个不同时刻的波函数

$$\langle q''\mid\psi(t'')\rangle$$

$$= \int \langle q'' \mid \hat{U}(t'', t') \mid q' \rangle \langle q' \mid \psi \mid t' \rangle \mathrm{d} q'$$

格林函数可用相空间的路径积分来表示

$$\langle q'' \mid \hat{U}(t'', t') \mid q' \rangle = \int \exp\left\{ i \int_{t'}^{t''} L \mathrm{d} t \right\} \prod_t \frac{\mathrm{d} P(t) \mathrm{d} q(t)}{2\pi}$$

其中 L 是拉格朗日函数，而 $\int_{t'}^{t''} L \mathrm{d} t$ 是经典力学的作用量。从 $q(t') = q'$ 到 $q(t'') = q''$，各种允许的经典力学轨道以等概率出现而仅贡献了不同的相位。因此，可从体系的经典力学描述提取量子力学信息。

四、单粒子问题
Single Particle Problems

一维无穷深势阱 infinite deep potential well in one dimension 一维无穷深势阱 $V(x) = \begin{cases} \infty, & x<0, x>a \\ 0, & 0<x<a \end{cases}$ 是一个理想化的模型。如果 $x<0$ 和 $x>a$ 区域势能的高度 V_0 远大于能量 E，则可作 $V_0 \to \infty$ 处理。相应的定态薛定谔方程解为

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \cdots$$

$$\psi_n = \begin{cases} 0 & , x<0, x>a \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{n\pi}{a} x, & 0<x<a \end{cases}$$

可见势阱宽度 a 越小，则能级越高且能级间隔越大——量子尺寸效应，能级越高，波函数振荡越剧烈。

一维方势阱 square potential well in one dimension 一维方势阱如图(a)中粗黑线所示的形状，其数学表达式为

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , |x|<a \\ -V_0, & |x|>a \end{cases}$$

束缚态的能量满足 $-V_0 < E < 0$，相应的定态薛定谔方程解如下：

偶宇称解

$$\psi = \begin{cases} A e^{\alpha x}, & x<-a \\ B \cos kx, & -a<x<a \\ A e^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

奇宇称解

$$\psi = \begin{cases} A e^{\alpha x}, & x<-a \\ C \sin kx, & -a<x<a \\ -A e^{-\alpha x}, & x>a \end{cases}$$

其中 $\alpha^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$，$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)$。利用 ψ 和 ψ' 在 $x = -a$ 连续，分别从上二式得到

$$B = \sec ka e^{-\alpha a} A$$

$$C = -\csc ka e^{-\alpha a} A$$

以及决定能量本征值的方程

$ka \operatorname{tg} ka = \alpha a$　　偶宇称解

$ka \operatorname{ctg} ka = -\alpha a$　　奇宇称解

注意 k、α 还满足

$$(ka)^2 + (\alpha a)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2$$

令 $ka = \xi$ 和 $\alpha a = \eta$，用作图法分别由二条曲线的交点定偶和奇宇称解相应的能量本征值，如图(b)。

当 $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2} \to 0$，仍有一个交点，故一维浅势阱中存在束缚态。当 $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} V_0 a^2} < \frac{\pi}{2}$，不存在奇宇称的解。由于交点的 η_i 是离散的，则能量也是离散的：$E_i = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\eta_i}{a}\right)^2$，相应波函数的形状见图(c)。

一维方势阱的自由态（散射态）能量 $E>0$，假定粒子从左方远处向右运动，定态薛定谔方程分段表示如下：

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi}{\mathrm{d} x^2} + k_1^2 \psi = 0,$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) > 0, \quad |x| < a$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 \psi}{\mathrm{d} x^2} + k^2 \psi = 0,$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E > 0, \quad |x| > a$$

解得

$$\psi = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx}, & x<-a \\ C e^{ik_1 x} + D e^{-ik_1 x}, & -a<x<a \\ F e^{ikx}, & x>a \end{cases}$$

由 ψ 和 $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ 在 $x = a$ 处的连续性条件，可得

$$C=\frac{k_1+k}{2k_1}e^{-i(k_1-k)a}F$$

$$D=\frac{k_1-k}{2k_1}e^{i(k_1+k)a}F$$

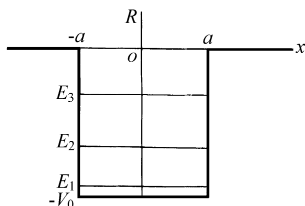
再由 ψ 和$\frac{d\psi}{dx}$在 $x=-a$ 处的连续性条件以及上二式,可得

$$A=\left[\frac{(k_1+k)^2}{4k_1k}e^{-2i(k_1-k)a}-\frac{(k_1-k)^2}{4k_1k}e^{2i(k_1+k)a}\right]F$$

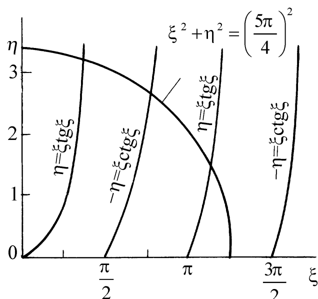
$$B=\left[i\frac{k_1^2-k^2}{2k_1k}\sin 2k_1a\right]F$$

可见反射波的振幅 B 一般不为零。但当

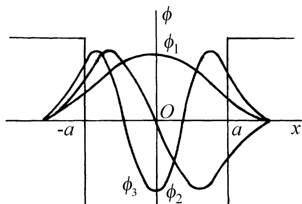
$$2k_1a=n\pi,\ n=1,2,3,\cdots$$



(a)



(b)



(c)

时,才没有反射波。此时,$\left|\frac{F}{A}\right|^2=1$,入射波全部透过势阱,称为共振透射。

二维谐振子 harmonic oscillator in two dimensions 二维各向同性谐振子的哈密顿算符

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}[\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2]+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2)$$

对定态薛定谔方程作分离变量求解,得到

$$E=\hbar\omega(n_1+n_2+1)$$

$$\psi_{n_1n_2}(x,y)=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)$$

对于 $n_1+n_2=n$ 的能级,其简并度 $f=n+1$。ψ_{n_1}和 ψ_{n_2}是一维线谐振子的波函数。

二维耦合谐振子 coupled harmonic oscillator in two dimensions 二维耦合谐振子的势能

$$V(x,y)=\frac{m}{2}\omega^2x^2+\frac{m}{2}\omega^2y^2+\lambda xy,\ 0<\lambda<m\omega^2$$

其定态薛定谔方程为

$$\left\{\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right]+V(x,y)\right\}\psi(x,y)=E\psi(x,y)$$

通过转动变换使 $V(x,y)$的二次型对角化:

$$\begin{vmatrix} x' \\ y' \end{vmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix}\begin{vmatrix} x \\ y \end{vmatrix}$$

动能 $\hat{T}\longrightarrow\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dx'^2}+\frac{d^2}{dy'^2}\right]$

势能 $V\longrightarrow\left(\frac{m}{2}\omega^2+\frac{\lambda}{2}\right)x'^2+\left(\frac{m}{2}\omega^2-\frac{\lambda}{2}\right)y'^2$

$=\frac{m}{2}\omega_1^2x'^2+\frac{m}{2}\omega_2^2y'^2$

对脱耦后的简正坐标 x'和 y',解得

$$E=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1+\left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2$$

$$\psi=\psi_{n_1}(x')\psi_{n_2}(y')$$

其中 ψ_{n_1}和 ψ_{n_2}是线性谐振子的能量本征函数。

三维谐振子 harmonic oscillator in three dimensions 三维各向同性谐振子的定态薛定谔方程为

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^3}{dz^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)\right]\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z)$$

用分离变量法解得

$$\psi(x,y,z)=\psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$$

$$E=\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

对于 $n=n_1+n_2+n_3$，相应能级的简并度

$$f=\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$$

粒子在有心力场中的运动 single particle in the central potential　粒子在有心力场中的运动的首要特征是角动量守恒，从而可以选取哈密顿量 $\hat{H}$、角动量的平方 $\hat{L}^2$ 和角动量的第三分量 $\hat{L}_z$ 构成力学量的完全集，角量子数 l 和磁量子数 m 均为好量子数。粒子的波函数可以写成径向部分和球谐函数的乘积，其中球谐函数只和角量子数和磁量子数有关，与能量量子数 n 无关；而径向部分只和能量量子数和角量子数有关，与磁量子数无关，即 $\psi(r,\theta,\varphi)=R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$。记该中心势场为 $V(r)$，则决定径向部分波函数的方程为 $\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{dR}{dr}+\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=0$，其中 m 是粒子的质量，而 E 是粒子的能量本征值，它与磁量子数无关。

氢原子 hydrogen atom　氢原子是最简单的原子，原子核带 $+e$ 电荷，一个电子在核外运动。了解氢原子的性质是研究多电子原子的重要基础。氢原子是量子力学可严格求解的系统，理论计算出的能级和实验结果完全符合，是量子力学正确性的有力证据。

氢原子（包括类氢离子）中的电子受原子核的库仑势作用

$$V(r)=\frac{-ze_s^2}{r},\ e_s=\frac{e}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}$$

求解氢原子的定态薛定谔方程，得到

$$E_n=\frac{-e_s^2}{2a_0}\frac{z^2}{n^2},$$

$$n=n_r+l+1=1,2,3,\cdots$$

$$\psi_{nlm}(\gamma,\theta,\varphi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

其中 a_0 是玻尔半径，n_r 是径向量子数，取 0，1，2，…，n 是主量子数，l 是角量子数，m 是磁量子数。$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是球谐函数，$l=0,1,2,\cdots$，当 l 确定时，$m=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm l$，有 $2l+1$ 种取值。

$$Y_{lm}=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

其中 $P_l^m(\cos\theta)$ 为缔合勒让特多项式。径向函数

$$R_{nl}(\rho)=\left\{\left(\frac{2z}{na_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}\right\}^{1/2}\cdot e^{-\frac{1}{2}\rho}\rho^l L_{n_r}^{2l+1}(\rho)$$

其中 $\rho=\alpha r=\frac{2z}{na_0}r$，$L_{n_r}^{2l+1}(\rho)$ 是缔合拉该尔多项式：

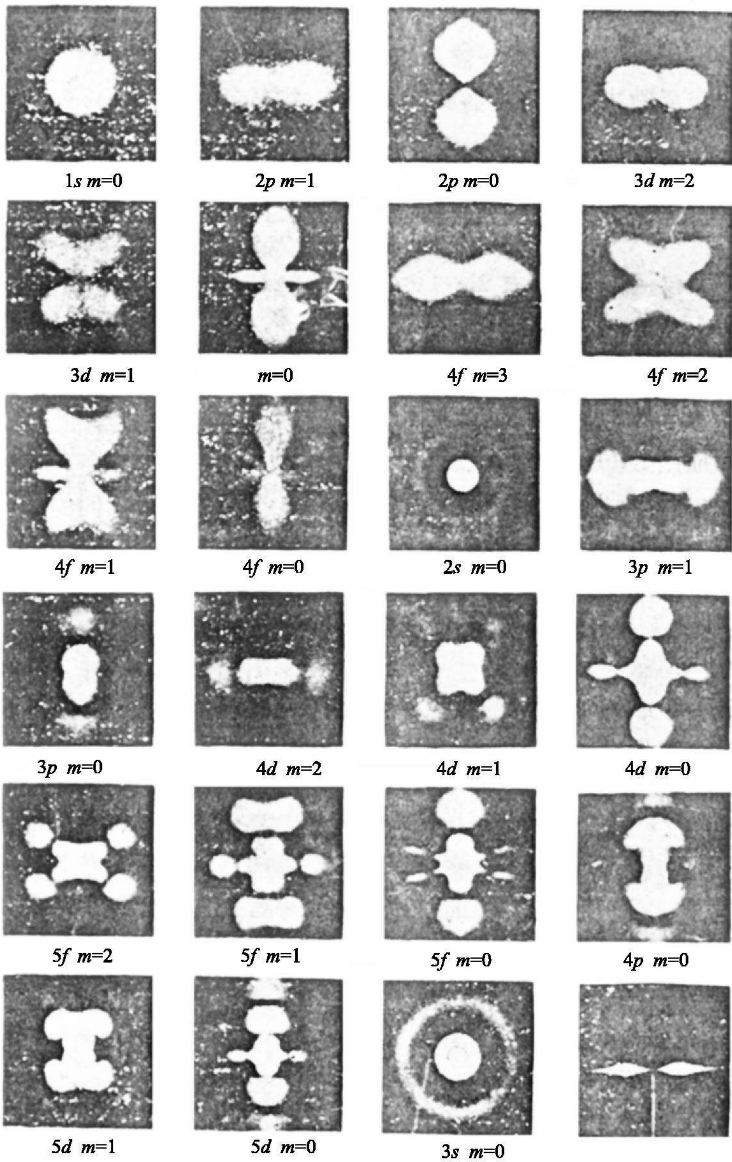
$$L_{n_r}^{2l-1}(\rho)=(-1)^{2l+1}\frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}}L_{n+l}(\rho)$$

$$L_k(\rho)=e^\rho\frac{dk}{d\rho k}[e^{-\rho}\rho^k]$$

由于 $\hat{L}^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}$，$\hat{L}_3Y_{lm}=m\hbar Y_{lm}$，$\psi_{nlm}$ 是 $\hat{H}$，$\hat{L}^2$，$\hat{L}_3$ 共同的本征函数。主量子数 n 决定能量 E_n；角量子数 l 决定轨道角动量平方 L^2 的大小，$L^2=l(l+1)\hbar^2$；磁量子数 m 决定轨道角动量第三分量 L_3 的大小，$L_3=m\hbar$。

E_n 能级的简并度 $f=n^2$。E_n 对 m 的简并源于库仑场 $V(r)$ 的球对称性，决定能量本征值的径向方程中含有 l 而不含 m。E_n 对 l 的简并性则取决于氢原子的动力学对称性，在与距离平方反比的吸引力作用下粒子的运动轨道闭合。除了氢原子的势场外，粒子在其他有心力场中运动的束缚态能量一般都与 l 有关。

氢原子 $|\psi_{nlm}|^2$ 的分布如图。



氢原子 $|\psi_{nlm}|^2$ 分布图 *

* 参考蔡建华著《量子力学》,P88

刚性转子 rigid rotator 定点刚性转子的哈密顿算符 $\hat{H}=\frac{1}{2I}\hat{L}^2$，$I$ 为定点转动的转动惯量。其本征值方程的解

$$\psi(\theta,\varphi)=Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$E_l=\frac{\hbar^2}{2I}l(l+1)$$

其中 Y_{lm}为球谐函数。E_l 对 m 简并，简并度为 $2l+1$。

定轴刚性转子的哈密顿算符 $\hat{H}=\frac{1}{2I}\hat{L}_3^2$，$I$ 为定轴转动的转动惯量。其本征值方程的解

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi},\ m=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

$$E_m=\frac{\hbar^2}{2I}m^2,\text{对}\pm m\text{ 简并}$$

碱原子 alkali atom 碱金属原子的价电子处在由原子核和内层电子组成的原子实的电场作用之下，采用原子实极化模型，电势能 $U(r)=\frac{-e^2}{r}+\frac{-e\tau}{r^2}$（高斯制），其中 τ 是原子实的电偶极矩。由于 τ 是小量，$\frac{-e\tau}{r^2}$项可作微扰处理。因此，碱原子的零级近似波函数就是氢原子的波函数 ψ_{nlm}，参见“氢原子”条。经 $\frac{-e\tau}{r^2}$项微扰后，氢原子由于势能 $\frac{-e^2}{r}$ 而具有的动力学对称性发生破缺，碱原子的能量 E_{nl}对 l 不再简并。由于考虑原子实极化后价电子仍受有心力场的作用，能级 E_{nl}对 m 仍然简并。

带电粒子在电磁场中的运动 charged particle moving in electromagnetic field 带电荷 q 的粒子在用矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 φ 描写的电磁场中的哈密顿量，在高斯单位制中为

$$H=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2+q\varphi \qquad (1)$$

其中 μ 为粒子的质量，c 为光速。应用式(1)可由正则方程得到带电粒子在电磁场中运动的牛顿方程，这说明式(1)的 H 是正确的。相应的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\partial\mu}(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{q}{c}\boldsymbol{A})^2\psi+q\varphi\psi \qquad (2)$$

磁场中的原子 atom in magnetic field 以 Na 原子为例，带 $-e$ 电荷的价电子的哈密顿量（采用高斯制）为

$$H=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A})^2+U$$

如果相对于原子尺寸，均匀磁场区很大，可以认为磁场 $\boldsymbol{B}$ 是均匀的。选 x_3 坐标轴沿 $\boldsymbol{B}$ 方向，可取矢量势为

$$\boldsymbol{A}=(-B\frac{x_2}{2},B\frac{x_1}{2},0)$$

把 $\boldsymbol{A}$ 代入哈密顿算符得到

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\left[-\frac{eB}{2\mu c}\hat{L}_3\right]+\frac{e^2B^2}{8\mu c^2}(x_1^2+x_2^2)+\hat{U}$$

其中 $\hat{L}_3$ 是轨道角动量算符的第三分量。对于原子系统，上式右方第二项可写成 $-\hat{\boldsymbol{M}}\cdot\boldsymbol{B}$，即轨道磁矩在磁场中的能量，其中轨道磁矩

$$\hat{\boldsymbol{M}}=\frac{-e}{2\mu c}\hat{\boldsymbol{L}}$$

由于原子尺寸是 10^{-8}cm 的量级，$\hat{H}$表示式右方第三项可以忽略，于是

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}-\hat{\boldsymbol{M}}\cdot\boldsymbol{B}+\hat{U}$$

由于 Na 原子的波函数近似等于氢原子的波函数 ψ_{nlm}，而这也是 $\hat{L}_3$ 的本征函数，所以磁场中 Na 原子的能量

$$E_{nlm}=E_{nl}+m\frac{e\hbar}{2\mu c}B=E_{nl}+mM_0B$$

式中 $M_0=\frac{e\hbar}{2\mu c}$叫玻尔磁子，它是原子磁矩的自然单位。由于磁场破坏了 Na 原子势场的球对称性，能级对 m 的简并消除。

电子在均匀磁场中的运动 electron moving in uniform magnetic field 设电子处在均匀恒定磁场 $\boldsymbol{B}$ 的作用之下。选坐标系的 z 轴沿 $\boldsymbol{B}$ 方向，矢量势 $\boldsymbol{A}$ 可取$(0,Bx,0)$。电子的哈密顿算符

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}[\hat{P}_x^2+(\hat{P}_y+\frac{e}{c}Bx)^2+\hat{P}_z^2]$$

由于$[\hat{P}_y,\hat{H}]=0$，$[\hat{P}_z,\hat{H}]=0$，所以 $\hat{H}$、$\hat{P}_y$、$\hat{P}_z$ 有共同的本征函数。已知 $\hat{P}_y$、$\hat{P}_z$ 的本征函数为平面波，则可令

$$\psi(x,y,z)=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{i(k_y y+k_z z)}\varphi(x)$$

代入定态薛定谔方程，可得 $\varphi(x)$ 满足位移谐振子的方程，最后得到

$$E=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}k_z^2,\ \omega=\frac{qB}{\mu c}$$

$$\psi_{nk_yk_z}=\frac{1}{2\pi\hbar}e^{i(k_y y+k_z z)}\varphi_n(x')$$

其中 $\varphi_n(x')=e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)$是位移振子的波函数，$\xi=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x'=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\left(x-\frac{\hbar k_y c}{qB}\right)$。能量对 k_y 简并，而 k_y 决定 x 方向的位移量。

阿哈伦诺夫-博姆效应 Aharonov-Bohm effect 在经典电磁场理论中，认为场（电场和磁场）是物理实在，而矢量势 $\boldsymbol{A}$ 和标量势 φ 只是用来描写场的辅助量，作规范变换并不影响对它们的描写。由于电子在电磁场中运动的薛定谔方程中出现的是势而不是场，如果坚持波函数是描写电子运动状态的，而薛定谔方程反映量子态的演化规律，则其中出现的电磁势应该是实在的物理量，不能有人为性。

阿哈伦诺夫和博姆，以矢量势为例研究了上述问题。他们设想让一束相干电子分成二束，绕过一无限长的通电螺线管（其外部是无场有势区域）后再汇合，如图(a)所示。他们论证了相遇后的两束电子会产生附加的相位差，且该相位差的大小与矢量势有关，因此附加相位差产生干涉效应和矢量势有关，这说明矢量势并不是人为的辅助场。

由于绕得严密的长螺线管外没有漏磁场而有矢量势 $\boldsymbol{A}$，于是电子束经过无磁场区的矢量势 $\boldsymbol{A}$ 是无旋的：

$$\nabla\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=0$$

这样，$\boldsymbol{A}$ 可以表示为标量函数 β 的梯度 $\boldsymbol{A}=\nabla\beta$ 即 $\beta=\int\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}$。

电子在磁场中运动的薛定谔方程（取高斯制）为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{1}{2\mu}\left(\hat{\boldsymbol{p}}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\psi$$

拿上述的 β 作规范变换

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\nabla\beta$$

要求薛定谔方程对于规范变换不变，则波函数要作相应的变换

$$\psi\to\psi'=\psi\exp\left[-i\frac{e}{\hbar c}\int\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\right]$$

图(a)中二路电子束相遇后的波函数为

$$\psi=\psi_1\exp\left[-i\frac{e}{\hbar c}\int_{\mathrm{I}}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\right]+\psi_2\exp\left[-i\cdot\frac{e}{\hbar c}\int_{\mathrm{II}}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}\right]$$

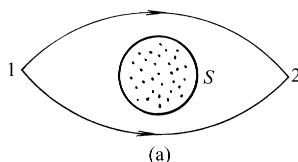
干涉结果由下式决定：

$$|\psi|^2=|\psi_1|^2+|\psi_2|^2+2Re\left\{\psi_1\psi_2^*\exp\left[-2\pi i\frac{\Phi}{\Phi_0}\right]\right\}$$

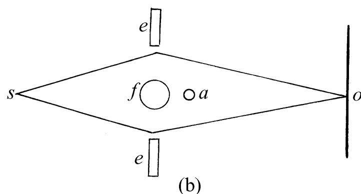
其中 $\Phi_0=ch/e$ 是磁通量子，而

$$\Phi=\int_{\mathrm{I}}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}-\int_{\mathrm{II}}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}=\oint\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{l}=\int_s\boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{s}$$

正是螺线管的磁通量。



(a)



(b)

图(b)是查姆伯斯(R.G.Chambers)验证 A-B 效应的实验示意图。S 是提供相干电子束的源，可由电子显微镜提供。O 是观察屏，e 是接地金属片，f 是浸镀铝的石英丝的剖面。efe 构成双棱镜，产生双缝干涉。a 是一根内有磁畴的铁须的截面。铁须起螺管的作用置于石英丝的阴影区。实验观察到铁须加入后，双缝干涉条纹发生移动。

A-B 效应表明该波函数有不可积的相位因子，是一种拓扑相位因子。

重力场中的干涉 interference in gravity field 1975 年，Covella、Overhauser 和 Werner 利用中子干涉仪测量了重力场引起的中子波函数的相移，证实在重力场中粒子德布罗意关系也

成立。二束能量相同而高度不同的中子束,由于重力势能不同而有相位差,可观察汇合后的干涉效应。此项实验简称 COW 实验。

如图低能中子束(波函数是波包)由 A 入射,三块相互平行的单晶切片使中子束一分为二沿着两条路径 $ABCEF$ 和 $ABDEF$ 前进,在 E 点汇合而发生干涉。为了调节 CE 和 BD 二路的高度差,整个三块单晶切片系统可绕直线 ABD 转动,转动角度为 φ。选择路径 $ABCEF$ 平面在水平面上时 $\varphi=0$。中子的德布罗意波长 $\lambda=1.45$Å, $BD=BC=S=4$cm, θ 角为 $22.5°$。由于重力势场是保守场,能量守恒。两路 $ABCEF$ 和 $ABDEF$ 中子,由于 CE 和 BD 的高度差,重力势能不同,则动能和动量也不相同。途经 CE 和 BD 的两束中子有相位差为

$$\delta=\frac{s}{\hbar}(P_{CE}-P_{BD})$$

由于能量守恒,有

$$\frac{1}{2\mu}P_{CE}^2=\frac{1}{2\mu}P_{BD}^2+\Delta U$$

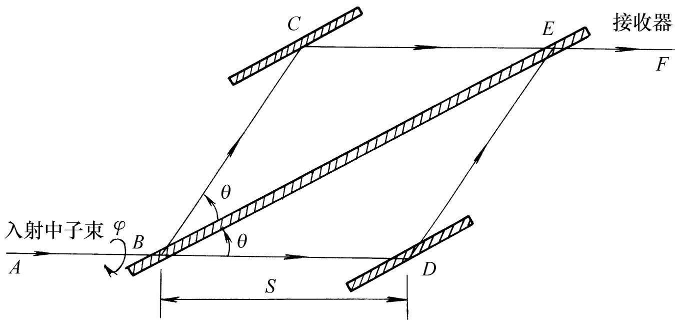
$$\Delta U=\mu g\Delta h=\mu gS\sin 2\theta\sin\varphi$$

实际上 ΔU 是小量,则

$$P_{CE}=[P_{BD}^2+2\mu\Delta U]^{1/2}\simeq P_{BD}+\frac{\mu\Delta U}{P_{BD}}$$

$$\delta=\frac{S}{\hbar}\frac{\mu\Delta U}{P_{BD}}=\frac{S}{\hbar}\frac{\mu\mu gs}{\frac{2\pi\hbar}{\lambda}}\sin 2\theta\sin\varphi$$

当 φ 变化时,二路汇合中子的相位差也变化,产生加强和抵消的干涉效应。实验中确实观察到干涉现象。



微分(或总)散射截面　differential (or total) scattering cross section　自由态问题中的散射数据与束缚态问题中的能谱处于同等重要地位,在分析处理散射数据时沿用了经典物理中散射截面的概念,它构架了理论与实验间的桥梁。微分散射截面定义为单位时间内被靶粒子——散射中心散射到(θ,ϕ)方位立体角 $d\Omega$ 内的粒子数 dn 与入射粒子流强度 N 之比除以 $d\Omega$

$$\sigma(\theta,\phi)=dn/(Nd\Omega),$$

而它的积分则叫做总散射截面

$$\sum=\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\sigma(\theta,\phi)$$

系统波函数由入射波与散射波——渐近球面波组成

$$\Psi=\Psi_i+\Psi_s\xrightarrow{r\to\infty}A\exp(ip_iz/\hbar)+[f(\theta,\phi)/r]\exp(ip_sr/\hbar),$$

其中 $f(\theta,\phi)$称为散射振幅。由此可计算入射与散射粒子流密度并进而推得

$$\sigma(\theta,\phi)=(p_s/p_i)|f(\theta,\phi)|^2$$

散射矩阵(S-矩阵)　scattering matrix (S-matrix)　设入射粒子-靶系统的哈密顿量为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$$

其中 $\hat{H}_0$ 为无相互作用的入射粒子与靶粒子系统的哈密顿量,而 $\hat{H}'$ 则描写二者之间的相互作用。欲知相互作用引起的后果,方法之一是在薛定谔绘景中求得系统的态矢量,即从薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t)=\hat{H}\Psi(t)$$

解得 $\Psi(t)$.上式的形式解为

$$\Psi_s(t)=\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s(t-t_0)]\Psi_s(t_0)$$

式中以下标 S 标记薛定谔绘景。显然,$\Psi_s(t)$ 随时间的演化既有赖于 $\hat{H}_0$ 又有赖于 $\hat{H}'_s$,而 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}'_s$ 一般来说是不可互易的。可见,采用薛定谔绘景研究相互作用问题或散射问题是颇为不便的。因此,就有必要将薛定谔绘景转换到仅在 $\hat{H}'_s$ 不为零时态矢量才随时间演化的相互作用绘景。作幺正变换

$$\Psi_s(t)\rightarrow\Psi_I(t)$$

$$=\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t'_0)]\Psi_s(t);$$

$$\hat{O}_s\longrightarrow\hat{O}_I=\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t'_0)]$$

$$\cdot\hat{O}_s\exp[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t'_0)]$$

(参数 t'_0 的意义十分明确,它代表所涉两种绘景的重合时刻。)则态矢量与力学量算符各自遵从下列方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_I(t)=\hat{H}'_I\Psi_I(t)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{O}_I(t)=[\hat{O}_I(t),\hat{H}_0]$$

应当注意,将任一系统的哈密顿量分解为两部分之和的方案也可以是任意的,因此,如令 $\hat{H}_0$ 为零,则所谓相互作用绘景就是薛定谔绘景,而如取 $\hat{H}'_I$ 为零,则相互作用绘景就是海森伯绘景。也可以说,相互作用绘景介于薛定谔绘景与海森伯绘景之间。它首先由 Tomonaga 与 Schwinger 引入,有时也简称为作用绘景(表象)。下面略去标记相互作用绘景的下标 I,并令

$$\Psi(t)=\hat{U}(t,t_0)\Psi(t_0)$$

据此定义及态矢量的可归一化条件,可知变换算符 $\hat{U}(t,t_0)$具有以下性质:

$$\hat{U}(t,t')\hat{U}(t',t_0)=\hat{U}(t,t_0)$$

$$\hat{U}^{-1}(t,t_0)=\hat{U}(t_0,t)$$

$$\hat{U}^{-1}(t,t_0)=\hat{U}^{+}(t,t_0)$$

且满足下列微分方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)=\hat{H}'\hat{U}(t,t_0)$$

或与之等价的积分方程

$$\hat{U}(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt_1\hat{H}'(t_1)\cdot\hat{U}(t_1,t_0)$$

通过逐次迭代,可得

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\hat{U}_n(t,t_0)$$

$$\hat{U}_n(t,t_0)=(\frac{1}{i\hbar})^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\hat{H}'(t_1)\cdot\hat{H}'(t_2)\cdots\hat{H}'(t_n)$$

式中各积分上限的早晚顺序为

$$t\geqslant t_1\geqslant t_2\cdots\geqslant t_n$$

有的时候,例如相对论理论中,需要把 $\hat{U}(t,t_0)$ 的级数展开式中的积分上限都对称化为 t。这可通过引入时序算符 $\hat{T}_p$ 来实现,它的作用是将算符依其时间的早晚顺序排列:

$$\hat{T}_p\{\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)\cdots\hat{H}'(t_n)\}$$

$$=\hat{H}'(t_{p_1})\hat{H}'(t_{p_2})\cdots\hat{H}'(t_{p_n});$$

$$t_{p_1}\geqslant t_{p_2}\geqslant t_{p_3}\cdots\geqslant t_{p_n}$$

于是,当 $n=2$ 时,有

$$\hat{T}_p\{\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)\}$$

$$=\theta(t_1-t_2)\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)+\theta(t_2-t_1)\cdot\hat{H}'(t_2)\hat{H}'(t_1)$$

$$=\begin{cases}\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2),\ t_1\geqslant t_2;\\ \hat{H}'(t_2)\hat{H}'(t_1),\ t_2\geqslant t_1。\end{cases}$$

$$\hat{U}_2(t,t_0)$$

$$=\frac{1}{2!}[\hat{U}_2(t,t_0)+\hat{U}_2(t,t_0)]$$

$$=\frac{1}{2!}(\frac{1}{i\hbar})^2[\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2\hat{H}'(t_1)\cdot$$

$\hat{H}'(t_2)\theta(t_1-t_2)+(t_1\leftrightharpoons t_2)]$

$$=\frac{1}{2!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\,\hat{T}_p[\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)]$$

类推

$\hat{U}_n(t,t_0)$

$$=\frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\boldsymbol{T}_p\{\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)\cdots\hat{H}'(t_n)\}$$

由此，可将$\hat{U}(t,t_0)$表为十分简捷的形式：

$$\hat{U}(t,t_0)=\hat{T}_p\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\,\boldsymbol{H}'(t')\right]$$

$\hat{U}(t,t_0)$具有下述物理意义：假设 $t=t_0$ 时，相互作用或微扰开始引入，系统这时处于$\hat{H}_0$（设它与时间无关）的第 i 个本征态$|\phi_i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_it_0}$，即

$|\Psi(t_0)\rangle=\exp[(i/\hbar)\hat{H}_0(t_0-t'_0)]\cdot|\Psi_s(t_0)\rangle=\exp(-iE_it'_0/\hbar)|\phi_i\rangle$。

而于 t 时刻系统所处的状态必可表为$\hat{H}_0$的各种本征态的叠加：

$|\Psi(t)\rangle=\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t'_0)]|\Psi_s(t)\rangle=\exp[\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t-t'_0)]\sum_j a_j(t)\cdot\exp(-iE_jt/\hbar)|\phi_j\rangle=\sum_j a_j(t)\cdot\exp(-iE_jt'_0/\hbar)|\phi_j\rangle$

于是，t 时刻发现系统处于$\hat{H}_0$的第 f 个本征态$|\phi_f\rangle$的概率为

$|a_f(t)|^2=|\exp(iE_ft'_0/\hbar)\langle\phi_f|\Psi(t)\rangle|^2=|\langle\phi_f|\hat{U}(t,t_0)\phi_i\rangle|^2=|U_{fi}(t,t_0)|^2$。

因此，系统由$\hat{H}_0$的第 i 个本征态跃迁到$\hat{H}_0$的第 f 个本征态的概率是

$$P_{i\to f}=|a_f(t)-\delta_{fi}|^2=|U_{fi}(t,t_0)-\delta_{fi}|^2$$

为方便起见，以下将所涉两种绘景的重合的时刻选择为 $t'_0=0$。以上所述内容，皆属于 t 与 t_0 都取有限值的情况。对于散射问题或相互作用问题而言，一个合理的假设是把粒子与靶的相互作用过程看做无穷长。入射粒子在 $t=t_0=-\infty$时处于自由状态，然后与靶发生相互作用，至 $t=\infty$时，逃脱出靶的影响范围，而又处于自由状态。以 $\Psi(-\infty)$代表系统的初态，它是$\hat{H}_0$的本征态，以 $\Psi(+\infty)$代表系统的末态，它是$\hat{H}_0$的各种本征态的叠加，则有

$$\Psi(+\infty)=\hat{S}\Psi(-\infty);$$

$$\hat{S}=\lim_{t\to\infty}\lim_{t_0\to-\infty}\boldsymbol{U}(t,t_0)$$

式中的算符 $\boldsymbol{S}$ 称为散射矩阵，它将初态与末态联系起来。设系统的初态为$\hat{H}_0$的第 i 个本征态，则散射过程结束后系统处于$\hat{H}_0$的第 f 个本征态的概率为

$$\lim_{t\to\infty}\lim_{t_0\to-\infty}|U_{fi}|^2=|S_{fi}|^2;$$

$$S_{fi}=\langle\phi_f|\hat{S}|\phi_i\rangle$$

而系统由$\hat{H}_0$的第 i 个本征态跃迁到$\hat{H}_0$的第 f 个本征态的概率是

$$P_{i\to f}=\lim_{t\to\infty}\lim_{t_0\to-\infty}|U_{fi}-\delta_{fi}|^2=|S_{fi}-\delta_{fi}|^2$$

可见，若散射矩阵为已知，则散射问题也就迎刃而解了。$\hat{S}$矩阵的表达式，依其定义，皆可由$\hat{U}(t,t_0)$的相应公式取极限而得。例如，其非编时级数表达式为

$$\hat{S}=\hat{S}_0+\hat{S}_1+\hat{S}_2+\cdots$$

$$=1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\,\hat{H}'(t_1)+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t_1\int_{-\infty}^{t_1}\mathrm{d}t_2\,\hat{H}'(t_1)\hat{H}'(t_2)+\cdots$$

由此可对它的矩阵元作微扰计算，如果取$\hat{H}_0$为对角的表象，则结果是

$$S_{fi}=\langle\phi_f|\hat{S}|\phi_i\rangle=\delta_{fi}-2\pi i\delta(E_f-E_i)T_{fi};$$

$$T_{fi}=(H'_s)_{fi}+\sum_n\frac{(H'_s)_{fn}(H'_s)_{ni}}{E_i-E_n+i0^+}+\cdots$$

式中的 T_{fi}正是跃迁矩阵$\hat{T}$的元素（参见“跃迁

矩阵”)。推导过程中已经按绝热假设将$\hat{H}'_s$代换为$\hat{H}_{1s}$,

$$\hat{H}'_s \rightarrow \hat{H}_{1s}=\begin{cases} e^{\eta t}\hat{H}'_s\,; t<0 \\ e^{-\eta t}\hat{H}'_s\,; t>0 \end{cases}$$

(小参数 η 的倒数代表相互作用的时间间隔),并利用了 δ 函数的下述定义式,

$$\delta(E_f - E_i)=\lim_{\eta\to 0}\frac{1}{\pi}\frac{\hbar\eta}{(\hbar\eta)^2+(E_f-E_i)^2}$$

利用的 δ 函数的另一种表示式

$$\delta(E_f - E_i)=\lim_{\eta\to 0}\frac{2\hbar\eta}{\pi}\left[\frac{\hbar\eta}{(\hbar\eta)^2+(E_f-E_i)^2}\right]^2$$

可得

$$\begin{aligned} w_{i\to f} &= \lim_{t-t_0\to\infty}\frac{1}{t-t_0}|U_{fi}-\delta_{fi}|^2 \\ &=\lim_{\eta\to 0}\eta|S_{fi}-\delta_{fi}|^2 \\ &=\frac{2\pi}{\hbar}|T_{fi}|^2\delta(E_f-E_i) \end{aligned}$$

散射矩阵与跃迁速率表式中出现 δ 函数,是散射过程遵守能量守恒定律的反映。更确切地说,如果末态能量是连续的,它表示仅当末态能量与初态能量相差无几时,跃迁概率才显著地不为零。但是,应当注意,上述 δ 函数的定义式仅在其宗量属于连续变量时才成立,如果它是不连续的,则式中右端的函数不能用 δ 函数来取代。换言之,如果给定的初态能量恰与$\hat{H}_s$的束缚态能级相等,则散射矩阵是奇异的。亦即,如果$\hat{H}_s$与$\hat{H}_0$有相同的能谱,则从严格的数学意义上说来,散射矩阵并不存在。但是,从物理的观点来看,以$\hat{H}_s$的束缚态能谱为极点的散射矩阵,仍然具有明确的意义,即,它不仅包含了系统的散射态的信息,也包含了束缚态的信息——若其极点(也就是散射振幅的极点)为已知,则就等于求出了离散谱。例如说,在一维势阱问题的透射振幅公式中,或者,在三维 Coulomb 散射振幅公式中,令其分母为零,即得系统的束缚态能级。总之,若散射矩阵为已知,则系统的散射态问题与束缚态问题也就都解决了。散射矩阵是否具有幺正性,涉及到入射波与散射波能否归一化为同一个结果,是一个需要弄清的问题。如果它是在严格意义上存在的,则答案是肯定的。因为,$\hat{U}(t,t_0)$在 t 与 t_0 都取有限值时是幺正的,如果它在 t 与 t_0 分别趋于正负无穷大时有确定的极限(条件是,$\hat{H}_s$与$\hat{H}_0$都没有分立谱),则此极限——亦即严格存在的散射矩阵,自然也是幺正的。而在$\hat{H}_s$与$\hat{H}_0$都有分立谱的情况下,需要区分不同情形分别加以分析:(1)散射过程是完全弹性的。$\hat{H}_0$与$\hat{H}_s$虽有离散谱,但由于入射粒子(在质心系中)的动能低于系统内部状态发生变化所需的能量,系统的(碰撞粒子的相对运动与内部运动)能态于散射过程结束后并不发生变化。因而射向散射中心的粒子流与从散射中心出射的粒子流是相等的,亦即入射球面波与出射球面波可归一化为同一个结果。而依定义,出射球面波由散射矩阵作用于入射球面波而得,故知,散射矩阵仍是幺正的;(2)散射过程是非弹性的,与第一种情况的不同之处在于,入射粒子的动能高于系统内态发生变化的阈值,可以引起系统的内态发生变化,使得末态粒子在能态上,甚至在性质上,有一定的概率不同于初态粒子。结果造成入射粒子流与出射粒子流是不等的,因此,散射矩阵不是幺正的;(3)系统始终处于束缚态。这个问题可以从两种观点来看待。第一种观点:虽然此时的散射矩阵并非是在严格意义上存在的,但有时候也从广义的观点出发,仍承认其存在性。于是,它在能谱复平面上的极点便确定了系统的束缚态能级。第二种观点:不承认非严格存在的散射矩阵的合法性。既然$\hat{H}_s$与$\hat{H}_0$有不同的能谱是造成散射矩阵非严格存在的根源,而$\hat{H}'_s$的分解方式又是任意的,那么,消除这一根源的办法显然就是,重新划分 H_s,使得$\hat{H}'_s$为零,即将$\hat{H}_s$定义为$\hat{H}_0$。即把这实质上并不存在的散射问题,恢复为系统哈密顿量为$\hat{H}_s$的定态问题,而定态解的归一化

问题自然是与时间无关的,而此时的散射矩阵(即单位矩阵)当然也就是幺正的。

就像已经提及的那样,对散射矩阵的定义有两种。历史上,海森伯首先引入散射矩阵,用以处理散射问题。按照原始的定义,散射矩阵只作用于散射态矢。因而,如果 $\hat{H}_0$ 除了有散射态本征矢之外还有束缚态矢,则散射矩阵作用于散射态矢后所给出的态矢空间,仅当 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_s$ 都没有束缚态矢时,才是完备的,亦即散射矩阵才肯定是幺正的。如果 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}_s$ 有束缚态矢,则一般说来,只使用 $\hat{H}_0$ 的散射态矢作为基来展开系统的态矢量是不够的(展开系数就是散射矩阵的元素),即散射矩阵不是幺正的。另外,若系统中存在着衰变过程,则其哈密顿量不再像通常情况那样,具有厄米性(因为有"阻尼"存在),因而系统态矢的归一化是时间相关的。随着历史的发展,如今,散射矩阵的定义范围经常不加说明地扩大到联系于系统的所有初态与一切末态,即它既用以描述弹性散射过程,同时也用以描述非弹性散射过程,或者说,它所描述的散射过程既包括输入道也包括反应道。这样一来,只要系统的相互作用过程不包括衰变过程,则系统的初末态矢自然可以归一化为相同的结果,亦即散射矩阵是幺正的。

跃迁矩阵(T-矩阵) transition matrix(T-matrix) 实际的散射问题中,入射粒子或靶粒子往往不是点粒子,而是具有内部结构的复合粒子,以至于它们之间的相互作用不仅与其相对坐标有关,也与其内部自由度有关。但只要系统的哈密顿量与时间无关,就可以建立与点粒子的势散射理论相似的形式解理论。设系统的哈密顿量与时间无关,记为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}',$$

其中 $\hat{H}_0$ 是所有独立子系统的哈密顿量的和,而 $\hat{H}'$ 描写它们之间的相互作用。设绝热地引进和退掉相互作用,则在散射前后,系统的状态由 $\hat{H}_0$ 决定。而其本征态矢设为已知:

$$\hat{H}_0|\Phi_a\rangle=E_a|\Phi_a\rangle$$

通常把 $\hat{H}_0$ 所表征的辅助系统称为实际系统的参考系统。假设 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{H}$ 的离散谱 $E<0$,而连续谱 $E\geqslant0$,且绝热引入相互作用后连续谱的能量值不变,即对应于 $\hat{H}_0$ 的连续谱中能量为 E_a 的态 $|\Phi_a\rangle$,有一个在 $\hat{H}$ 的连续谱中的能量为 E_a 的态 $|\Psi_a\rangle$

$$(E-\hat{H}_0)|\Psi_a\rangle=\hat{H}'|\Psi_a\rangle$$

上方程的解形式上可写为

$$|\Psi_a^{(\pm)}\rangle=|\Phi_a\rangle+\hat{G}^{(\pm)}\hat{H}'|\Psi_a^{(\pm)}\rangle$$

$$\hat{G}^{(\pm)}=\frac{1}{E_a-\hat{H}_0\pm i0^+}$$

此式称为 Lippmann-Schwinger 方程,$|\Psi_a^{(-)}\rangle$ 与 $|\Psi_a^{(+)}\rangle$ 分别称为入射态与出射态,而 $\hat{G}^{(-)}$ 与 $\hat{G}^{(+)}$ 分别为入射与出射 Green 函数算符。为了在有关计算中能恰当地处理能谱参数复平面上的极点,式中已用 $\dfrac{1}{E_a-\hat{H}\pm i0^+}$ 取代了 $\dfrac{1}{E_a-\hat{H}_0}$. L-S 方程可以迭代求解,结果得到

$$|\Psi_a^{(\pm)}\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{E_a-\hat{H}_0\pm i0^+}\hat{H}'\right)^n|\Phi_a\rangle$$

$$=\left(1+\frac{1}{E_a-\hat{H}\pm i0^+}\hat{H}'\right)|\Phi_a\rangle$$

以 $\langle\Phi_b|\hat{H}'$ 作用于上式,可得

$$\langle\Phi_b|\hat{H}'|\Psi_a^{(\pm)}\rangle=\langle\Phi_b|\hat{T}^{(\pm)}|\Phi_a\rangle=T_{ba}$$

$$\hat{T}^{(\pm)}=\hat{H}'+\hat{H}'\frac{1}{E_a-\hat{H}\pm i0^+}\hat{H}'$$

以 $\langle\Phi_b|$ 作用于 L-S 方程两端,又可得

$$\langle\Phi_b|\Psi_a^{(\pm)}\rangle=\delta_{ba}+T_{ba}^{(\pm)}/(E_a-E_b\pm i0^+)$$

式中已用了态矢量的正交(箱)归一化条件。$\boldsymbol{T}^{(+)}$ 称为跃迁矩阵,通常简单记为 $\boldsymbol{T}$(由上可

见，其元素比例于跃迁概率幅），微扰（由 $\boldsymbol{H}'$ 表示）引起的一切结果皆可通过其元素来表述，故问题的关键在于它的计算。利用算符展开式

$$\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}+i0^+}=\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}_0+i0^+}\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\left(\hat{\boldsymbol{H}}'\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}_0+i0^+}\right)^n$$

可得跃迁矩阵的微扰级数公式

$$\hat{\boldsymbol{T}}=\hat{\boldsymbol{H}}'+\hat{\boldsymbol{H}}'\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}_0+i0^+}\hat{\boldsymbol{H}}'+\hat{\boldsymbol{H}}'\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}_0+i0^+}\hat{\boldsymbol{H}}'\frac{1}{E_a-\hat{\boldsymbol{H}}_0+i0^+}\hat{\boldsymbol{H}}'+\cdots$$

及其元素的微扰计算公式

$$T_{b(j)a(i)}=H'_{b(j)a(i)}+\sum_{c(k)}\frac{H'_{b(j)c(k)}H'_{c(k)a(i)}}{E_{a(i)}-E_{c(k)}+i0^+}+\cdots$$

$$H'_{b(j)c(k)}=(1/V)\int e^{-i\boldsymbol{p}^0_{b(j)}\cdot\boldsymbol{x}}\langle j\,|\,\boldsymbol{H}'\,|k\rangle e^{i\boldsymbol{p}_{c(k)}\cdot\boldsymbol{x}}d^3x$$

式中已假定入射粒子与靶的相对运动和内部运动可以分开来处理

$$\hat{\boldsymbol{H}}=\hat{\boldsymbol{H}}_0+\hat{\boldsymbol{H}}';\ \hat{\boldsymbol{H}}_0=\hat{\boldsymbol{K}}+\hat{\boldsymbol{H}}_{10}+\hat{\boldsymbol{H}}_{20}$$

$$\hat{\boldsymbol{K}}|\phi_{a(i)}\rangle=(\boldsymbol{p}^2_{a(i)}/2\mu)|\phi_{a(i)}\rangle$$

$$(\hat{\boldsymbol{H}}_{10}+\hat{\boldsymbol{H}}_{20})|i\rangle=\varepsilon_i|i\rangle$$

其中 $\hat{\boldsymbol{H}}_{10}$ 与 $\hat{\boldsymbol{H}}_{20}$ 分别描述入射粒子与靶的内部结构，$\hat{\boldsymbol{K}}$ 则描写它们的相对运动，而 $\hat{\boldsymbol{H}}'$ 为入射粒子与靶的相互作用哈密顿量。

李普曼-许温格方程 Lippmann-Schwinger equation 用态矢量和算符来讨论势散射问题的形式解，得到李普曼-许温格方程

$$|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}\rangle=|\Phi_{\boldsymbol{k}}\rangle+\frac{1}{E_k-\hat{H}_0\pm i0^+}\hat{V}|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}\rangle$$

其中

$$\hat{H}_0=\frac{1}{2\mu}\hat{p}^2,\ \hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$$

$$\hat{H}|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}\rangle=E_k|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}\rangle$$

$$\hat{H}_0|\Phi_{\boldsymbol{k}}\rangle=E_k|\Phi_{\boldsymbol{k}}\rangle$$

当采用坐标表象时 L-S 方程成为积分方程

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{2\mu}{4\pi\hbar^2}\int\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}')d^3r'$$

，$\psi_k^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$满足不同的边条件。当 $V(\boldsymbol{r})$是小量时，可对 L-S 方程作迭代解，得到微扰级数。

光学定理 optical theorem 在微分（总）散射截面中给出了微分散射截面 $\sigma(\theta,\phi)$与散射振幅 $f(\theta,\phi)$间的关系式

$$\sigma(\theta,\phi)=(p_s/p_i)|f(\theta,\phi)|^2$$

但是，应当说，上式对于 $\theta=0$ 是没有定义的，因为在 $\theta=0$ 的方向上不可能区分入射波与散射波。然而，可以把 $\sigma(\theta\neq0)$与 $f(\theta\neq0)$延拓到 $\theta=0$ 上去，结果得到 $\sigma(\theta=0)$与 $f(\theta=0)$。其中 $f(0)\equiv f(\theta=0)$称为向前散射振幅或零角度散射振幅，在弹性散射情况下，它与总散射截面$\sum$间存在下列普遍关系

$$\sum=\frac{4\pi\hbar}{p_i}\mathrm{Im}f(0)$$

由上式可见，仅由向前散射振幅的虚部即可决定散射截面。由于这一关系式最初是在研究光的散射时发现的，故称为光学定理。易证，辏力场中的弹性散射（参见“分波法”）符合光学定理，下面证明任意力场中的弹性散射也是如此。设 $\boldsymbol{n}'$为散射粒子方向。系统总波函数为相应于各个入射方向 $\boldsymbol{n}$ 的$\hat{\boldsymbol{H}}$的本征函数的线性叠加

$$\Psi\xrightarrow{r\to\infty}\int F(\boldsymbol{n})e^{ikr\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{n}}d\Omega+\frac{e^{ikr}}{r}\cdot\int F(\boldsymbol{n})f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')d\Omega=\frac{2\pi ie^{-ikr}}{kr}\cdot F(-\boldsymbol{n}')-\frac{2\pi ie^{ikr}}{kr}\hat{\boldsymbol{S}}F(\boldsymbol{n}'),$$

$$\hat{\boldsymbol{S}}=1+\hat{\pi},\ \hat{\pi}F(\boldsymbol{n}')=\frac{ik}{2\pi}\int f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')F(\boldsymbol{n})d\Omega$$

由于 $r\to\infty$，第一个积分中的因子 $e^{ikr\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}'}$是变矢量 $\boldsymbol{n}$ 的急剧振荡函数，因此 $\boldsymbol{n}=\pm\boldsymbol{n}'$起主要贡献，$F(\boldsymbol{n})\approx F(\pm\boldsymbol{n}')$可以拿到积分号外。上式推导中用了这个性质。从上式易见波函数表式中的第一项表示射向散射中心的波，而第

二项则代表离开散射中心的波。在弹性散射情况下,射向散射中心的粒子流与离开散射中心的粒子流是相等的,亦即入射球面波与出射球面波可归一化为同一个结果。根据上式,这意味着散射算符 $\hat{S}$ 必是幺正的,$\hat{S}\hat{S}^{+}=1$。这个条件又可写为

$$f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}')-f^{*}(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n})=\frac{ik}{2\pi}\int f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'')f^{*}(\boldsymbol{n}',\boldsymbol{n}'')\,\mathrm{d}\Omega''$$

由此得

$$\mathrm{Im}\,f(0)\equiv\mathrm{Im}\,f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n})=\frac{k}{4\pi}\int|f(\boldsymbol{n},\boldsymbol{n}'')|^{2}\mathrm{d}\Omega''=\frac{k}{4\pi}\sum$$

分波法 method of partial waves　辏力场 $U(r)$ 中的低能弹性散射问题宜于用下述分波法近似处理,当然,其原则上的适用范围并不局限于低能情形。设 $rU(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$,则满足边界条件 $\Psi\xrightarrow[r\to\infty]{}e^{ikz}+\frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}\xrightarrow[r\to\infty]{}\sum_{l}(2l+1)i^{l}\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr}P_{l}(\cos\theta)+\frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}$ 之薛定谔方程解的一般形式为

$$\Psi=\sum_{l}R_{l}(r)P_{l}(\cos\theta)\xrightarrow[r\to\infty]{}\sum_{l}A_{l}\frac{\sin(kr-l\pi/2+\delta_{l})}{kr}P_{l}(\cos\theta)$$

式中各项依角量子数 $l=0,1,2,\cdots$,分别称为 s 分波,p 分波,d 分波…。对比 Ψ 的两种形式可见,各分波的散射相互独立,第 l 个分波散射后的相位移动(简称相移)为 δ_{l},利用球谐函数之正交性还可得散射振幅

$$f(\theta)=(1/k)\sum_{l}(2l+1)P_{l}(\cos\theta)\exp(i\delta_{l})\sin\delta_{l},$$

微分散射截面 $\sigma=|f(\theta)|^{2}$ 与总截面

$$\sum=4(\pi/k^{2})\sum_{l}(2l+1)\sin^{2}\delta_{l}$$

相移 phase shift　一般而言,行波的相位变化反映了其传播过程中的“遭遇”。若不曾受到障碍物的干扰(散射),则波一直沿着其相位连续增加的方向前进,即相位变化的连续性刻画了波的自由传播特征。而若(入射)波遭遇了散射中心的散射,则笼统地说,从散射中心发出的散射波的相位含有某种跃变部分,它反映了波的散射特征。问题是只有将入射波与散射波化为可比的(分波)结构时才能确切地定义并析出此跃变部分(这在一般情况下不易做到)。而通常所说的相移特指辏力场势散射引起的各球面分波——例如,第 l 个球面分波的相位突变或相位移动 δ_{l},若它已求出,则直接代入公式就可得到散射截面(参见“分波法”)。除了分波法(直接解薛定谔方程)之外,还有多种方法,可用以近似计算相移。这里列出一种相移满足的积分方程:

$$\sin\delta_{l}(k)=-k\int_{0}^{\infty}\frac{2\mu}{\hbar^{2}}U(r)\Psi_{l}(kr)j_{l}(kr)r^{2}\mathrm{d}r$$

$$j_{l}(kr)\longrightarrow\frac{\sin(kr-l\pi/2)}{kr}$$

$$\Psi_{l}\xrightarrow{r\to\infty}\frac{\sin(kr-l\pi/2+\delta_{l})}{kr}$$

$$\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}r^{2}}(r\Psi_{l})+\left[k^{2}-\frac{l(l+1)}{r^{2}}-\frac{2\mu}{\hbar^{2}}U(r)\right]\Psi_{l}=0$$

其中 j_{l} 为 l 阶球 Bessel 函数,$U(r)$ 为引起散射的辏力势,k 为入射波波数,μ 是折合质量。这一积分方程的推导过程十分简单:以 $-r^{2}j_{l}$ 乘以 Ψ_{l} 满足的微分方程,再以 $r^{2}\Psi_{l}$ 乘以 j_{l} 满足的自由粒子的径向方程,然后将二者相加,最后利用三角恒等式

$$\sin\alpha\cos(\alpha+\delta_{l})-\sin(\alpha+\delta_{l})\cos\alpha=-\sin\delta_{l},$$

即可得到上述公式。如果难以解得 Ψ_{l},可用 j_{l} 取代 Ψ_{l} 从上列积分方程求出相移的第一级近似,高级近似可从此出发依次迭代解出。由于 j_{l} 是一个振荡衰减很快的函数,当其第一极大位置 $l/k>a$(散射势的有效力程)时,它所遭受的势场的影响已很小。因此,相移 δ_{l} 只要从 $l=0$ 计算到 $l\sim ka$ 就可以了,而在 $ka\ll1$ 时,则只要计算一个相移 δ_{0} 就能相当准确地得到散射截面。另一方面,若通过实验先测得散射截面,则可由实验曲线拟合反推得相移 δ_{l},然后由此进一步反推粒子的互作用形式——这构成了反散射问题的重要内容。

朗道能级 the Landau level　电子或其他带电粒子在 z 方向磁场中运动由于受到洛伦兹力的作用在垂直于 z 方向的运动受到约束而在 z 方向仍保持自由运动。这一微观系统的薛定谔方程首先由 L.D.朗道(L.D.Landau)解

出，由此得到的均匀、间隔的能级被称之为朗道能级，朗道能级是高度简并的，因此每个能级上可以容纳大数的电子。朗道能级和相应的波函数的性质在对量子霍尔效应和反常量子霍尔效应等的研究中有重要的应用。

量子霍尔效应 quantum Hall effect 1980年冯·克里岑（Von·Keitzing）等发现当反型层中电子密度增加时，Hall 电导 σ_{xy}在 e^2/h（e 是电子电荷，h 是普朗克常数）的整数倍处会出现平台，称为量子霍尔效应。另外在 σ_{xy}保持量子化值的平台范围内 Hall 电导 σ_{xx}精确地等于零，这些效应不仅不受杂质和无序存在的影响，反之，“脏”（即杂质和无序的存在）似乎是该效应存在的必要条件。由于他在实验上首先发现并研究这一效应，冯·克里岑获得了1986年的诺贝尔物理学奖。

反常量子霍尔效应 anomalous quantum Hall effect 1982年崔琪（D. Tusi）等发现在量子霍尔效应的平台中还存在着有规律的细致结构，就是在一个台阶的$\frac{1}{2m+1}$（m 取正整数）处，例如1/3，1/5，1/7 等处也出现小的台阶，进而又发现在分母为偶数的分数处，例如 1/2 处，以及由下面连分式确定的分数值上也出现台阶

$$\gamma=\cfrac{1}{2m+1+\cfrac{\alpha_1}{p_1-\cfrac{\alpha_2}{p_2-\cfrac{\alpha_3}{p_3-\cdots}}}}$$

式中 m 是正整数，p_j 是偶整数，$\alpha_j=\pm1$，例如取 $m=1$，$\alpha_1=1$，$p_1=2$，j 到 1 为止，可得 $\gamma=\frac{2}{7}$。在对该效应的理论研究中劳夫林（R. B. Lauphline）根据准二维多电子系波函数的反对称性，波函数需具备的解析行为再加与超流 Jastron 函数的相似性，建立了著名的劳夫林波函数，并以此为基础在阐明该效应的研究中做出卓越的贡献。崔琪和劳夫林均因对该效应有重大贡献而荣获1998年度的诺贝尔物理学奖。

粒子在周期场中的运动 single particle in the periodical potential 粒子在周期场中的运动的首要特征是势场具有平移对称性，从而粒子的能谱表现为能带结构。能带结构对于定性理解固体的导电性具有重要意义。周期场中运动的粒子的能量本征函数满足布洛赫（Bloch）定理，例如在一维情形，设势场的周期为 a，那么 $\psi(x+a)$与 $\psi(x)$仅相差一个相位因子，即 $\psi(x)=\exp(ikx)\Phi_k(x)$，而 $\Phi_k(x+a)=\Phi_k(x)$为一与势场周期相同的周期函数，k 为 Bloch 波数。

五、量子力学的近似方法
Approximate Method in Quantum Mechanics

微扰 perturbation 在量子力学或其他物理学分支中可获精确解的问题不多，故需探索与应用各种近似方法。其中常用之一为微扰法，它适用于问题中的参数为小量的情况。这种参数一般是无量纲化的，称为微扰参数或微扰量。依参数进行的近似处理称为参数微扰。此外，微扰量也可是无量纲形式的自变量，此时的近似处理称为坐标微扰。依微扰量函数序列所作解的渐近展开称为微扰级数（未必是幂级数），其中诸项依次称为零级近似、一级近似…。若能一级接一级无穷推算下去，逐次提高解的精确度，则这种近似称为有理近似，反之称为无理近似。有理近似随微扰量趋于零将变为精确解，而无理近似则不能在此极限甚或其他极限下过渡到精确解。一致有效的微扰级数在问题时空范围内能处处达到足够的精确度，而非一致有效者的性态则在局部失效区内将从某一级近似起愈来愈坏，这两种情形分别属于正则微扰与奇异微扰问题。

含时微扰论 time-dependent perturbation theory 若一体系的哈密顿量为时间的显函数，则其量子力学问题一般属于非定态问题——难以精确求解，但当哈密顿量可分解为两部分，其中$\hat{\boldsymbol{H}}_0$与时间无关，仅$\hat{\boldsymbol{H}}_1(t)$显含时间，且又满足条件$\langle\hat{\boldsymbol{H}}_1\rangle/\langle\hat{\boldsymbol{H}}_0\rangle\ll1$ 时，则可用含时微扰论近似处理。设$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的本征函数$\{\phi_n\}$

与本征值$\{E_n\}$为已知，体系波函数$\Psi(\boldsymbol{x},t)$总可表为$\Psi(\boldsymbol{x},t)=\sum_n a_n(t)\phi_n\cdot\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t)$，将它代入薛定谔方程可得

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_m(t)}{\mathrm{d}t}=\sum_n a_n(t)H_{1mn}\exp[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)t];\ H_{1mn}=\int\phi_m^*\hat{\boldsymbol{H}}_1\phi_n\mathrm{d}\boldsymbol{x}$$

式中系数$a_m(t)$可展为微扰级数后逐次迭代解出。设微扰在$t=0$时开始引入，此时系统处于$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的第l个本征态，则准至一级近似的解为

$$a_m(t)=a_m^{(0)}+a_m^{(1)}=\delta_{ml}+(\frac{1}{i\hbar})\int_0^t\mathrm{d}\tau H_{1ml}\cdot\exp[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_l)\tau]$$

据$a_m(t)$的物理意义知，系统由初态ϕ_l跃迁到终态ϕ_m的概率为

$$P_{l\to m}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t\mathrm{d}\tau H_{1ml}\exp[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_l)\tau]\right|^2$$

定态非简并微扰论 time-independent perturbation theory for nondegeneracy case 其应用对象之哈密顿量不显含时间，可分为两部分的相加：$\hat{\boldsymbol{H}}=\hat{\boldsymbol{H}}_0+\hat{\boldsymbol{H}}_1$，其中$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的本征值$\{E_n^{(0)}\}$是非简并的，且已与本征函数$\{\Psi_n^{(0)}\}$一道解出；而$\hat{\boldsymbol{H}}_1$在期待值意义下可作为附加于$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的微扰对待。预期微扰的结果会使$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的本征值产生与$\hat{\boldsymbol{H}}_1$同量级的变化，且使其本征函数发生相关的变形，遂将$\hat{\boldsymbol{H}}$的本征值与本征函数(按惯例以隐含微扰参数形式)作幂级数展开：

$$E_n=E_n^{(0)}+E_n^{(1)}+E_n^{(2)}+\cdots;$$

$$\Psi_n=\Psi_n^{(0)}+\Psi_n^{(1)}+\Psi_n^{(2)}\cdots,$$

式中右端各项之上标代表其量阶。把两式代入$\hat{\boldsymbol{H}}$的本征值方程并依量阶之不同析出一系列递推方程，然后将$\Psi_n^{(\lambda)}$按$\{\Psi_n^{(0)}\}$展开，利用其正交性，终得

$$\Psi_n=\Psi_n^{(0)}+\sum_{m\neq n}[H_{1nm}/(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})]\Psi_m^{(0)}+\cdots$$

$$E_n=E_n^{(0)}+H_{1nn}+\sum_{m\neq n}|H_{1nm}|^2/(E_n^{(0)}-E_m^{(0)})+\cdots$$

定态简并微扰论 time-independent perturbation theory for degeneracy case 对于$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的本征值$E_j^{(0)}$为简并的情况，预期微扰的结果不仅类似于非简并情况那样，使能级与本征函数发生与不含时微扰哈密顿量$\hat{\boldsymbol{H}}_1$同量阶的变化，且还将使能隙为零的诸简并态$\{\Psi_{j\alpha}^{(0)}\}(\alpha=1,2,\cdots,g)$发生混合或跃迁，故$\hat{\boldsymbol{H}}=\hat{\boldsymbol{H}}_0+\hat{\boldsymbol{H}}_1$之本征函数的零级近似应表为$\Psi_{j\alpha}^{(0)}$的线性组合。遂将$\hat{\boldsymbol{H}}$的本征函数$\Psi_j$及相应的本征值依$\hat{\boldsymbol{H}}_1$的量阶展为

$$\Psi_j=\sum_\alpha a_\alpha^{(0)}\Psi_{j\alpha}^{(0)}+\Psi_j^{(1)}+\Psi_j^{(2)}\cdots$$

$$E_j=E_j^{(0)}+E_j^{(1)}+E_j^{(2)}\cdots,$$

按$\hat{\boldsymbol{H}}_0$的所有本征函数展开$\Psi_j^{(1)}$并将上式代入薛定谔方程，可得方程组

$$\sum_\alpha(\langle\beta|\hat{\boldsymbol{H}}_1|\alpha\rangle-E_j^{(1)}\delta_{\beta\alpha})a_\alpha^{(0)}=0;\quad \beta=1,2,\cdots,g$$

由其非零解条件——久期方程，立得能量一级修正的g个根$E_{j\rho}^{(1)}$，每个根代回上式可得一组系数$a_{\alpha\rho}^{(0)}$，而每一套$a_{\alpha\rho}^{(0)}$给出一个零级波函数。高级近似则可视简并性消除状况分别以定态简并微扰论或定态非简并微扰论处理之。

玻恩近似 Born approximation 若入射粒子动能甚大于它与散射中心的互作用势能且此互作用属短程力，则可用下述Born近似法计算散射截面。据含时微扰论，入射粒子进入力程后将在散射中心势场$U(\boldsymbol{r})$的微扰作用下，由动量为$\boldsymbol{p}_0$的初态跃迁(散射)到动量为$\boldsymbol{p}$的末态，其单位时间内的跃迁概率$w=(2\pi/\hbar)|\langle\boldsymbol{p}|U(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{p}_0\rangle|^2\delta(E_0-E)$；用$L^3$-箱归一化条件，则入射粒子流密度可表示为$N=n(p_0/\mu)L^{-3}$，动量大小为$p\to p+\mathrm{d}p$，方向在$\mathrm{d}\Omega$内的状态数为$(L/2\pi)^3p^2\mathrm{d}p\mathrm{d}\Omega$，从而得一粒子单位时间内跃迁到$\mathrm{d}\Omega$内诸态的概率，即$n$个粒子中散射到$\mathrm{d}\Omega$内粒子的数目所占比例

$$\frac{\mathrm{d}n}{n}=\int_{p=0}^{\infty}\mathrm{d}p\,w(\mathrm{L}/2\pi)^3\mathrm{p}^2d\Omega$$

$$=\frac{\mu p_0}{(2\pi\hbar^2)^2L^3}\left|\int U(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}\right)\right|^2\mathrm{d}\Omega$$

式中 $\boldsymbol{K}=(\boldsymbol{p}_0-\boldsymbol{p})/\hbar$, $p=p_0$, $K=(2p_0/\hbar)\cdot\sin(\theta/2)$。据其定义终得微分截面

$$\sigma(\theta,\phi)=\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar}\right)^2\left|\int\mathrm{d}\boldsymbol{r}e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}U(\boldsymbol{r})\right|^2$$

选择定则 selection rule 当受到含时扰动作用时一系统诸定态间就有可能发生跃迁,选择定则则指明了其中哪些跃迁是可以实现的。不能实现的跃迁称为禁戒跃迁。设系统的哈密顿量 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'(t)$,则易证,仅当 H'_{ij} 不为零时 $\hat{H}_0$ 的第 i 个本征态与第 j 个本征态间的跃迁才是允许的,这就指明了确定选择定则的途径。选择定则的概念起源于光的发射与吸收理论,在这一理论中,$\hat{H}'(t)$ 代表原子中电子在交变电磁场中的势能。一价原子偶极跃迁(仅保留电偶极子项)的选择定则是 $\Delta l=l'-l=\pm1$, $\Delta m=m'-m=0,\pm1$;虽然偶极禁戒的跃迁也可能符合电四极跃迁选择定则:$\Delta l=0,\pm2$;$\Delta m=0,\pm1,\pm2$,或磁偶极跃迁选择定则:$\Delta l=0$;$\Delta m=0,\pm1$,但跃迁概率较小。任何一级近似中均被禁戒的跃迁称为严格禁戒跃迁。据 Einstein 理论,除受激跃迁过程外,还同时存在遵从同样选择定则的自发辐射过程,它是一种由电磁场零点振动引起的纯粹量子效应。

W.K.B.近似 Wentzel-Kramers-Brillouin approximation(W.K.B. approximation) W.K.B.近似,又称准经典近似,是一种将普朗克常数 $\hbar$ 作为微扰量,近似处理问题的方法。其物理依据是,量子效应由 $\hbar$ 来表征,当量子效应较弱时它就可作为小量对待。作变换 $\Psi=\exp(is/\hbar)$,则薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi+V(x)\Psi=E\Psi$$

化为

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x}\right)^2+\frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2s}{\mathrm{d}x^2}=E-V(x)$$

将 s 展为 $\hbar$ 的幂级数:

$$s=s_0+\hbar s_1+\hbar^2s_2+\cdots,$$

代入上式后比较 $\hbar$ 的同幂次项立得一系列递推方程,由此可解得

$$s_0(x)=\pm\int^x p(x)\mathrm{d}x,$$

$$s_1=\frac{i}{2}\ln p(x)+\text{常数},$$

$$p(x)=\sqrt{2m(E-V(x))}$$

因此,准至一级近似,可得波函数

$$\Psi=\begin{cases}\dfrac{A}{\sqrt{p}}e^{\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)\mathrm{d}X}+\dfrac{B}{\sqrt{p}}e^{-\frac{i}{\hbar}\int^x p(x)\mathrm{d}x}, & E>V(x)\\ \dfrac{C}{\sqrt{|p|}}e^{-\frac{i}{\hbar}\int^x|p(x)|\mathrm{d}x}+\dfrac{D}{\sqrt{|p|}}e^{\frac{i}{\hbar}\int^x|p(x)|\mathrm{d}x}, & E<V(x)\end{cases}$$

式中常数 A,B,C,D 由边条件及归一化条件确定。上式的适用条件,即微扰级数一致有效的条件显然为 $\hbar|s_1|\ll|s_0|$,或 $\hbar|p'/p^2|\ll1$。由此可见:(1)W.K.B.近似的适用条件为,在粒子的德布罗意波长 $\lambda=\hbar/p$ 尺度内势能 $V(x)$ 必须是缓变的:$\left|\frac{\lambda}{2(E-V)}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right|\ll1$;(2)在 $p\sim0$ 的经典转向点附近,这一近似条件总是不能成立的,故需以其他方法专门加以分析,以衔接其两侧的解。可以证明这一连接公式为

$$|Q(x)|^{-1/2}\{2\sin\eta\exp[\int_x^{x_1}|Q|\mathrm{d}x]+\cos\eta\cdot\exp[-\int_x^{x_1}|Q|\mathrm{d}x]\}\xleftarrow{\eta\neq0,-\pi/2<\eta<\pi/2}$$

$$2Q(x)^{-1/2}\cos[\int_{x_1}^x Q\mathrm{d}x-\pi/4+\eta],$$

$$|Q(x)|^{-1/2}\exp[-\int_x^{x_1}|Q|\mathrm{d}x]\xrightarrow{(\eta=0)}$$

$$2Q(x)^{-1/2}\cos[\int_{x_1}^x Q\mathrm{d}x-\pi/4]$$

式中 x_1 为经典转向点,x 轴方向依 $x-x_1$ 与 $Q^2(x)=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]$ 同符号的规则选取,箭头符号表示经典转向点两侧渐近解的过渡方向。

黄金规则 golden rule 在含时微扰论中给出了如下(准至一级近似的)跃迁概率公式

$$P_{l\to m}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t\mathrm{d}\tau H_{1ml}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(E_m-E_l)\tau\right]\right|^2.$$

现设 $\hat{H}_1$(仅在 $t>0$ 时不为零)与时间无关,则

上式化为

$$P_{l\mapsto m}=\frac{|H_{1ml}|^2}{\hbar^2}\frac{\sin^2(\omega_{ml}t/2)}{(\omega_{ml}/2)^2}$$

$$\underset{t\to\infty}{=}\frac{2\pi t}{\hbar^2}|H_{1ml}|^2\delta(\omega_{ml})$$

$$=\frac{2\pi t}{\hbar}|H_{1ml}|^2\delta(E_m-E_l),$$

其中，$\omega_{ml}=(E_m-E_l)/\hbar$。

而跃迁速率——即单位时间的跃迁概率则为

$$w_{l\mapsto m}=\frac{P_{l\mapsto m}}{t}=\frac{2\pi}{\hbar}|H_{1ml}|^2\ \delta(E_m-E_l)$$

由此可见，对于常微扰且作用时间很长的情况，跃迁速率与时间无关，并且只在末态能量接近于初态能量(即 $E_m\sim E_l$)的小范围内，才显著地不为零。设系统在 E_m 附近的 $\mathrm{d}E_m$ 大小的范围内的能态数目为 $\rho(E_m)\mathrm{d}E_m$，[$\rho(E_m)$ 称为态密度]则从初态跃迁到这些末态的(总的)跃迁速率为

$$w=\int \mathrm{d}E_m\rho(E_m)\,w_{l\mapsto m}=\frac{2\pi}{\hbar}|H_{1ll}|^2\rho(E_l)$$

鉴于上式的重要意义——它可用于处理各种跃迁过程，E.Fermi 称它为第二黄金规则，而通常则称之为黄金规则。

定态格林函数　time-independent Green's functions in stationary state　格林函数方法是求解偏微分方程的一种重要方法。定态格林函数是求解单粒子定态薛定谔方程所使用的格林函数。

设 $\hat{H}=\hat{H}_0+V$，将定态薛定谔方程写成

$$[E-\hat{H}]\psi(\boldsymbol{r})=0\quad 或$$

$$[E-\hat{H}_0]\psi(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})=\rho(\boldsymbol{r})$$

如果约定无穷远处势能 $V(\infty)=0$，则 $E<0$ 的解为束缚态，$\psi(\infty)=0$，能量本征值 E_n 是离散的，我们要求解 E_n 和 ψ_n；而 $E>0$ 的解为自由态，能量 E 是连续的，要求解 ψ_E 和态密度 $N(E)$——E 附近单位能量间隔的状态数。若求得和 $\hat{H}$ 相应的定态格林函数，就可完成上述求解任务。

定义 $\boldsymbol{r}$ 表象中和 $\hat{H}$ 相应的定态格林函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 满足

$$(z-\hat{H})\,G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

其中 z 是复数，并要求 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 和定态薛定谔方程的解 $\psi(\boldsymbol{r})$ 满足相同的边界条件。由于束缚态和自由态的边界条件不同，格林函数随之而分类。$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 表示 r' 处有点源，$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 代表由 $\hat{H}$ 描写的系统对点源的响应。由于方程中 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 有奇异性，所以作为方程解的 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 也有奇异性。

由于坐标表象的局限性，把格林函数 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)$ 看做格林函数算符 $\hat{G}(z)$ 在坐标表象的矩阵元

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)=\langle\boldsymbol{r}|\hat{G}(z)|\boldsymbol{r}'\rangle$$

则 $\hat{G}(z)$ 满足方程

$$(z-\hat{H})\hat{G}(z)=1$$

若取 $\hat{H}$ 为对角的表象，设能量本征值离散，$\hat{H}|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle$，$\sum\limits_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|=1$；对于 $z\neq E_n(z-\hat{H})$ 有逆算符，所以

$$\hat{G}(z)=\frac{1}{z-\hat{H}}=\frac{1}{z-\hat{H}}\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

$$=\sum_n\frac{|\psi_n\rangle\langle\psi_n|}{z-E_n}$$

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)=\sum_n\frac{\psi_n(\boldsymbol{r})\psi_n^*(\boldsymbol{r}')}{z-E_n}$$

若格林函数已经求出，则由其单极点得到离散谱 E_m；若 E_m 不简并，则格林函数对角元 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};E_m)$ 的留数就是 $|\psi_m(\boldsymbol{r})|^2$：

$$\mathrm{Res}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};E_m)=\psi_m(\boldsymbol{r})\psi_m^*(\boldsymbol{r})$$

如果 E_m 简并，$\hat{H}\psi_{mi}=E_m\psi_{mi}$，$i=1,2,3,\cdots,f_m$，则

$$\mathrm{Res}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};E_m)=\sum_{i=1}^{f_m}\psi_{mi}(\boldsymbol{r})\psi_{mi}^*(\boldsymbol{r})$$

就是在 $\boldsymbol{r}$ 处测到有能量 E_m 粒子的概率密度；E_m 能级的简并度

$$f_m=\int\mathrm{Res}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r};E_m)\mathrm{d}^3r$$

如果 $\hat{H}$ 的本征值有连续谱 $z=E>0$，则 $\hat{G}(z)$ 存在支切，这时可以定义边极限

$$\hat{G}^{(\pm)}(\lambda)=\frac{1}{\lambda-\hat{H}\pm i0^{+}}$$
$$=P\frac{1}{\lambda-\hat{H}}\mp i\pi\delta(\lambda-\hat{H})$$

其中上式第二步等号,基于复变函数中积分号下的恒等式,P 表示积分取柯西主值。由上式可得到态密度

$$N(\lambda)=\mp\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}[\mathrm{Tr}\,\hat{G}^{(\pm)}(\lambda)]$$

其中 Tr 表示求迹运算。

利用和 $\hat{H}_0$ 相应的格林函数 $\hat{G}_0(z)=(z-\hat{H}_0)^{-1}$,可得

$$\hat{G}(z)=[z-\hat{H}_0-\hat{H}_1]^{-1}$$
$$=\{(z-\hat{H}_0)[1-(z-\hat{H}_0)^{-1}\hat{H}_1]\}^{-1}$$
$$=[1-\hat{G}_0(z)\hat{H}_1]^{-1}\hat{G}_0(z)$$
$$=\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{H}_1\hat{G}_0+\hat{G}_0\hat{H}_1\hat{G}_0\hat{H}_1\hat{G}_0+\cdots \quad (1)$$
$$\hat{G}(z)=\hat{G}_0(z)+\hat{G}_0(z)\hat{H}_1\hat{G}(z) \quad (2)$$

以上式(1)是 $\hat{G}(z)$ 的微扰级数;式(2)是戴逊(Dyson)方程。微扰级数可由戴逊方程的迭代解得到。

如对戴逊方程取坐标表象,设 $\hat{H}_1=V(\boldsymbol{r})$,得到积分方程:

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)=G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}';z)+\int d^3r_1\,G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1;z)V(\boldsymbol{r}_1)G(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}';z)$$

利用微扰级数(取有限项或部分项求和)或戴逊方程,可以求解格林函数。

突发近似 sudden approximation 设外界对粒子作用的势能突然发生变化,势能 $V\to V'$,以致波函数来不及变化。这样,势能突变时刻的波函数成为突变发生后 $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}'$ 系统的近似初始波函数。

浸渐近似 adiabatic approximation 设外界对粒子作用的势能缓慢变化,慢到任一瞬间都可近似认为系统处于定态:

$$\hat{H}(\theta)\psi(\boldsymbol{x},\theta)=E_n(\theta)\psi_n(\boldsymbol{x},\theta)$$

θ 是时间,则含时薛定谔方程的解

$$\psi_n(\boldsymbol{x},t)=U_n(\boldsymbol{x},t)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\theta)d\theta\right]$$

其中的相位因子称为动力学相位因子。

量子力学的变分原理 the variational principle of the quantum mechanics 微观体系的能量本征值可通过在一定的边界条件下求解薛定谔方程并要求所得的波函数满足归一化条件而实现。可以证明与此等价的变通途径是根据变分原理来求能量和波函数。变分原理说:假设体系的能量平均值可表为波函数对哈密顿算符的平均值,则体系的能量和波函数也可通过在归一化条件下使能量平均值取极值而得到。变分原理的价值在于,可以根据微观体系的物理特点确定波函数必须具有的性质并据此来建立含若干参数的尝试函数,然后求出尝试函数形式下的能量平均值,由该平均值取极值来定出所含参数的值,从而确定在所取形式下的最佳波函数和相应的能量。可以证明按变分原理求出的能量平均值,不低于体系基态能量的严格值,所选尝试函数愈能符合体系的物理特点则求得的能量近似值愈接近(但总高于)基态能量的严格值。

尝试函数 trial function 这是用变分法求解量子力学束缚定态问题时所使用的性质接近严格波函数而又含参量 q 的波函数,可利用变分原理调节参量使尝试函数趋近严格的波函数。

量子力学的变分原理表明:使束缚态的能量平均值泛函

$$I[\psi]=\frac{\int\psi^*\hat{H}\psi(\boldsymbol{x})d^3x}{\int\psi^*\psi(\boldsymbol{x})d^3x}$$

取极值的 $\psi(\boldsymbol{x})$ 满足定态薛定谔方程

$$\hat{H}\psi(\boldsymbol{x})=E\psi(\boldsymbol{x}),\ E=I[\psi]$$

调节含参量 $q[q_1,q_2,\cdots q_f]$ 的波函数 $\psi(\boldsymbol{x},q)$ 中的参量,是变更函数的一种手段。找一个性质和定态薛定谔方程严格解相近的尝试波函数 $\psi(\boldsymbol{x},q)$,并求得能量平均值是参量 q 的函数 $I(q)$。再利用变分原理调节参量

$$\frac{\partial I(q)}{\partial q_i}=0,\ i=1,2,3,\cdots,f$$

联立解得 $q_i=q_i^0$，则归一化的尝试函数

$$\psi(\boldsymbol{x},q^0)/\sqrt{\int\psi^*(\boldsymbol{x},q^0)\psi(\boldsymbol{x},q^0)\mathrm{d}^3x}$$

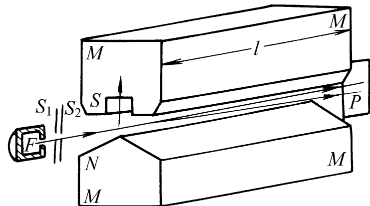
就是近似的解，相应的能量平均值为 $I[\psi(\boldsymbol{x},q^0)]$，就是近似的能量本征值。

六、自旋与角动量
Spin and Angular Momentum

精细结构 fine structure 用高分辨率的光谱仪来观察原子光谱时，发现碱金属光谱的主线系和第二辅线系的每一条谱线实际上都是由两条线组成，而第一辅线系和伯格曼(A. Bergmann)系的每一条谱线都是由三条线组成。这称为碱金属光谱线的精细结构，氢原子光谱也有精细结构，但较为复杂。光谱线的精细结构源自电子自旋和轨道间的耦合，这部分附加能量引起了能级的进一步分裂，从而造成原子光谱的分裂。

斯特恩-格拉赫实验 Stern-Gerlach experiment 为了测量原子的磁矩，让原子束通过不均匀磁场，如果原子的磁矩在磁场方向的分量有不同的数值，则原子在该方向受不同的作用力，从而在该方向有不同的偏移距离。只要预先测定磁场的梯度，原子的平均速率(可由发出原子的炉子温度推得)就可按照

$$\Delta z=\frac{\pi}{16}\frac{L^2}{kT}\left(\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}z}\right)M_z$$



由原子束在 z 方向的偏移量 Δz 定出原子磁矩的 z 分量 M_z。其中 L 为不均匀磁场(磁体)的长度，k 为玻尔兹曼常数，T 为绝对温度。用 Na 原子束做实验，结果一束分成两束，测得 $M_z=\pm M_0$，M_0 是玻尔磁子 $\frac{e\hbar}{2\mu}$。由于 Na 原子的价电子处在 $3S$ 态，轨道磁矩为零，实验测到的磁矩只能来源于电子的自旋运动。斯特恩-格拉赫实验是电子有内禀的自旋运动的实验基础之一。

实验装置如图。

爱因斯坦-德哈实验(效应) Einstein—D. ter Haar experiment(effect) 电子自旋磁矩和自旋角动量的关系

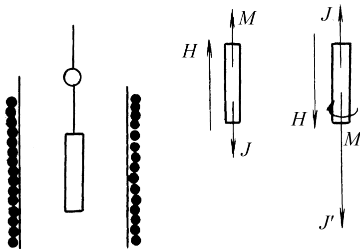
$$\boldsymbol{M}_s=-\frac{e}{\mu}\boldsymbol{S}=-g_s\frac{e}{2\mu}\boldsymbol{S},\ g_s=2$$

而轨道磁矩和轨道角动量的关系

$$\boldsymbol{M}_L=-\frac{e}{2\mu}\boldsymbol{L}=-g_L\frac{e}{2\mu}\boldsymbol{L},\ g_L=1$$

二者回磁比的差别，使得可以通过实测磁性材料的回磁比 g 来检验自旋效应。

爱因斯坦-德哈实验如下图所示：在螺线管的轴上用石英丝悬挂一测试样品棒。当螺线管通电流时，样品棒被磁化，有磁矩 $M_z=\sum_i M_{zi}$，i 代表原子；棒也有了相应的内部角动量；$J_z=\sum_i J_{zi}$。突然反转电流方向，磁场



和棒磁矩跟着反向，角动量也跟着反向。根据角动量守恒定律，棒必以 $2J_z$ 的角动量绕反转后的磁场方向作整体转动。此项棒整体转动的角动量 $2J_z$ 可由石英丝的最大扭转角和石英丝的扭转系数而测量。测出 M_z 和 J_z，可计算回磁比 g。实测结果表明：对顺磁材料，$1<g<2$；对铁磁材料，$g=2$。可见铁磁材料的磁性来源于自旋；而顺磁材料的磁性，轨道和自旋运动二者都有贡献。

电子自旋 spin of electron 电子自旋包括自旋角动量和自旋磁矩两方面的物理内容。电子的自旋运动和轨道运动的耦合，引起能级和原子光谱的精细结构。

为了解释碱金属原子光谱的精细结构，还有在弱磁场中，原子光谱线的分裂，即“反常”塞曼(Zeeman)效应，人们逐步认识到，电子还有一内禀运动的自由度—自旋。实际上，电子的自旋源自一种相对论性量子效应，可由相对论性量子力学波动方程—狄拉克方程从理论上自然引出。它最初由乌伦贝克(G.E.Uhlenbeck)和高德斯密特(S.A.Goudsmit)于1925年作为假设提出，以解释精细结构和反常塞曼效应。电子的这种内禀自由度，由自旋来表征，自旋角量子数只取$\frac{1}{2}$一个值，它的某方向分量取$\pm\frac{1}{2}$两个值。1921—1922年，由斯特恩(O.Stern)和格拉赫(W.Gerlach)完成的银原子束通过不均匀磁场后发生偏转，并分成两束的实验而得到直接证实。

泡利矩阵 Pauli matrices 电子自旋角动量算符$\hat{\boldsymbol{S}}$与轨道角动量算符$\hat{\boldsymbol{L}}$应满足相同的代数关系

$$[\hat{L}_1,\hat{L}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_3, 1,2,3 \text{ 轮转}$$

$$[\hat{S}_1,\hat{S}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{S}_3, 1,2,3 \text{ 轮转}$$

在 S_3 表象，建立$\hat{S}_i=\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$的矩阵表示，得到

$$\hat{\sigma}_1=\begin{vmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{vmatrix};\hat{\sigma}_2=\begin{vmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{vmatrix};$$

$$\hat{\sigma}_3=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{vmatrix}$$

这三个矩阵称为泡利矩阵。

泡利方程 Pauli equation 在计入电子的自旋自由度以后，t时落在$\boldsymbol{x}$处的电子，可以有自旋朝上和朝下的区别，$\psi_{\pm}(\boldsymbol{x},t)$分别表示自旋朝上($S_3=\frac{\hbar}{2}$)和朝下($S_3=-\frac{\hbar}{2}$)的概率幅，则状态用旋量

$$\begin{vmatrix}\psi_+(\boldsymbol{x},t)\\ \psi_-(\boldsymbol{x},t)\end{vmatrix}$$

表示。薛定谔方程变成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{vmatrix}\psi_+(\boldsymbol{x},t)\\ \psi_-(\boldsymbol{x},t)\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}H_{++} & H_{+-}\\ H_{-+} & H_{--}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\psi_+(\boldsymbol{x},t)\\ \psi_-(\boldsymbol{x},t)\end{vmatrix}$$

这个联立方程组被称为泡利方程。其中 H 的矩阵是$\hat{H}$在 S_3 表象的表示，例如 $H_{+-}=\langle+|\hat{H}|-\rangle$。

超精细结构 hyperfine structure 由于核子具有自旋角动量与自旋磁矩，原子核也有磁矩。原子核的磁矩在核外电子运动产生的磁场中有相互作用能量；因核子质量为电子质量的1836倍，原子核的磁矩比原子磁矩小三个量级以上，所以与核磁矩有关的附加能量引起原子能级和光谱线的超精细结构。由原子光谱的超精细结构，可以获得原子核角动量的信息。

角动量 angular momentum 由经典力学中的轨道角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 经一次量子化得到算符$\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$，即$\hat{L}_1=\hat{x}_2\hat{p}_3-\hat{x}_3\hat{p}_2$，1、2、3轮转。根据量子条件，得到$\hat{\boldsymbol{L}}$的代数性质

$$[\hat{L}_1,\hat{L}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{L}_3, 1、2、3 \text{ 轮转}$$

自旋角动量算符$\hat{\boldsymbol{S}}$应有和$\hat{\boldsymbol{L}}$相同的代数性质

$$[\hat{S}_1,\hat{S}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{S}_3, 1、2、3 \text{ 轮转}$$

考虑角动量的合成，例如粒子的总轨道角动量算符$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$，由于$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{S}}$的作用对象不同，因此它们可以交换，则$\hat{\boldsymbol{J}}$有代数性质

$$[\hat{J}_1,\hat{J}_2]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_3, 1、2、3 \text{ 轮转}$$

对于二个电子的轨道、自旋或总角动量的合成，合成的总轨道角动量、总自旋角动量或二体系统的总角动量也都有相同的上述代数性质。

定义角动量算符$\hat{\boldsymbol{J}}$满足代数性质，即

$$\hat{\boldsymbol{J}}\times\hat{\boldsymbol{J}}=\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{J}}$$

由此可得：

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_i]=0, i=1、2、3$$

根据角动量算符的代数性质，可求得$\hat{J}^2$、$\hat{J}_3$共同的本征矢量：

$$\hat{J}^2|j,m_j\rangle=j(j+1)\hbar^2|j,m_j\rangle$$

$$\hat{J}_3|j,m_j\rangle=m_j\hbar|j,m_j\rangle$$

其中：$j=\begin{cases}0,1,2,\cdots\text{零或正整数}\\ \frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots\text{半奇整数}\end{cases}$

$$m_j=j,j-1,\cdots,-j$$

当 j 确定时，$J^2=j(j+1)\hbar^2$ 的本征子空间为 $2j+1$ 维，以这些 $|j,m_j\rangle$ 为基，可以建立 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_i$ 的矩阵表示：

$$\hat{J}^2=j(j+1)\hbar^2\begin{vmatrix}1&&&\\&1&&\\&&\ddots&\\&&&1\end{vmatrix}$$

$$\hat{J}_3=\hbar\begin{vmatrix}j&&&\\&j-1&&\\&&\ddots&\\&&&-j\end{vmatrix}$$

而 $\hat{J}_1$、$\hat{J}_2$ 的矩阵可由 $\hat{J}_\pm=\hat{J}_1\pm i\hat{J}_2$ 矩阵得到：

$$\hat{J}_1=\frac{1}{2}(\hat{J}_++\hat{J}_-),\hat{J}_2=\frac{1}{2i}(\hat{J}_+-\hat{J}_-)$$

由

$$\hat{J}_\pm|j,m_j\rangle=\sqrt{(j\mp m_j)(j\pm m_j+1)}\cdot\hbar|j,m_j\pm1\rangle$$

可以建立 $\hat{J}_\pm$ 矩阵，进一步得到 $\hat{J}_1$ 和 $\hat{J}_2$ 矩阵。例如：

$$j=S=\frac{1}{2},\hat{S}_3=\frac{\hbar}{2}\begin{vmatrix}1&0\\0&-1\end{vmatrix},$$

$$\hat{S}_1=\frac{\hbar}{2}\begin{vmatrix}0&1\\1&0\end{vmatrix},\hat{S}_2=\frac{\hbar}{2}\begin{vmatrix}0&-i\\i&0\end{vmatrix}$$

$$j=l=1,\hat{L}_3=\hbar\begin{vmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{vmatrix},$$

$$\hat{L}_1=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{vmatrix},$$

$$\hat{L}_2=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{vmatrix}$$

克累布施-戈尔登系数 Clebsch-Gordan coefficients 对于角动量相加 $\hat{J}=\hat{J}(1)+\hat{J}(2)$，其中 $\hat{J}(1)$ 和 $\hat{J}(2)$ 是两个独立子系统的角动量，由于它们的作用对象不同，可以交换，所以 $\hat{J}$ 也满足角动量算符的定义。

求 $\hat{J}^2$、$\hat{J}_3$ 共同的本征矢量 $|jm\rangle$，采用 $\hat{J}_3(1)$ $\hat{J}_3(2)$ 共同的本征矢 $|j_1m_1\rangle\cdot|j_2m_2\rangle=|j_1j_2m_1m_2\rangle$（未耦合基）作为基矢，有：

$$\sum_{m_1m_2}|j_1j_2m_1m_2\rangle\langle j_1j_2m_1m_2|=1$$

$$|jm\rangle=\sum_{m_1m_2}\langle j_1j_2m_1m_2|jm\rangle\cdot|j_1j_2m_1m_2\rangle$$

由于耦合基 $|jm\rangle$ 也是正交归一的完备基，则克累布施-戈尔登系数 $C(j_1j_2j,m_1m_2m)=\langle j_1j_2m_1m_2|jm\rangle$ 是由未耦合基到耦合基的幺正变换系数（矩阵元）。C-G 系数非零的条件：

$$j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,|j_1-j_2|$$

$$m=m_1+m_2$$

因为未耦合基是 $\hat{J}_3=\hat{J}_3(1)+\hat{J}_3(2)$ 的本征矢，满足方程

$$\hat{J}_3|j_1j_2m_1m_2\rangle=(m_1+m_2)\hbar\cdot|j_1j_2m_1m_2\rangle$$

分析 $m=m_1+m_2$ 的简并性，取简并的各未耦合基的线性叠加使成 $\hat{J}^2$ 的本征矢量（耦合基），叠加系数（C-G 系数）由 $\hat{J}^2$ 矩阵（由各简并的未耦合基为基构成）的对角化来确定。在转动群的有关文献资料中，可查到 C-G 系数值。

自旋轨道耦合 spin-orbit coupling 电子的自旋运动包含自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 和自旋磁矩 $\boldsymbol{M}_s=-\frac{e}{\mu}\boldsymbol{S}$ 两种物理效应。原子中的电子在核的有心力场中作轨道运动，由其波函数可计算出绕 z 轴的电流密度，可见轨道运动将产生内部磁场。这种内部磁场对电子的自旋磁矩产生作用，称为自旋轨道耦合。耦合能为

$$H_{Ls}=\frac{\mu_0}{4\pi}\times\frac{1}{2\mu}\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}\right)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$$

该项能量是产生原子光谱的精细结构和反常塞曼(P.Zeeman)效应的原因。

反常塞曼效应 anomalous Zeeman effect 在弱磁场中的原子,由于磁场足够弱,因而自旋轨道耦合能量不能忽略;原子能级的精细结构因弱磁场的存在而进一步发生分裂,称为反常塞曼效应。

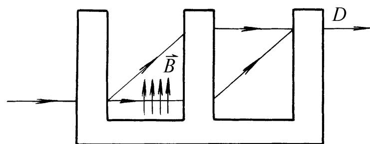
普雷斯顿(T.Preston)在1897年首先报告了锌和镉原子在弱磁场中的反常塞曼效应光谱。在引入电子的自旋轨道耦合能后,反常塞曼效应得到了圆满的解释。

磁共振 magnetic resonance 当把具有未成对电子或核子的物质放置于外磁场 H 中时,就会因电子(或核子)自旋磁矩与外磁场的相互作用而产生能级分裂,能级分裂间距为

$$\Delta E = g_e M_0 H$$

其中 M_0 为玻尔(N.Bohr)磁子,g_e 为电子的朗德(Lande)因子。对核而言 $\Delta E = g_N M_N H$,其中 M_N 和 g_N 分别为核磁子和核的朗德因子。同时在垂直于外磁场方向的平面内再加上一频率为 ν 的旋转磁场(实际为电磁波),当电磁波的能量量子与磁能级分裂间距相等时,即 $h\nu = g_e M_0 H$(或 $g_N M_N H$)时,就会发生物质从电磁波吸收能量的共振现象,称为磁共振。对电子而言,称为电子顺磁共振(EPR),由于顺磁性起因是电子的自旋,因此又称为电子自旋共振(ESR)。对原子核而言,称为核磁共振(NMR)。由于核磁子 M_N 比电子的玻尔磁子 M_0 小约三个量级,因此对应的能级分裂间距要小三个量级,在当前实验室条件下,H 不大于20T,电子顺磁共振的电磁波波长为厘米波,而核磁共振的电磁波波长为米波,因此极易区分。电子顺磁共振现象是1944年由苏联科学家柴伏依斯基(U.K.Эавойский)首先发现的,很快形成了电子顺磁共振技术,可用于研究光合作用,致癌机理,催化原理,辐射效应,聚合过程,化学交换现象和反应中间产物等当代科技重大课题。核磁共振特别在液态有机化合物方面有广泛应用。

旋量干涉 spinor interference 中子的自旋 $S=\frac{1}{2}$,非相对论性中子的波函数是二分量的旋量,空间转动 2π 时,旋量符号改变。在磁场区如果极化矢量(正比于自旋 $\boldsymbol{S}$ 的期望值)绕磁场的进动而转动了 2π,则磁场引起旋量波函数的相位改变 π,利用这一性质,可以观察中子的干涉。如图所示,利用山字形的单晶硅,将单色($\lambda=1.445$Å)中子束分为两路,如果其中一路中子经过磁场区而波函数变号,则两束中子汇合后相干涉。



一束中子进入长度为 l 的均匀磁场区,其哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}+g\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\cdot\boldsymbol{B}=T+H_s$$

设中子动能较大而磁场 B 较小,使得中子进入磁场区时的反射效应可以忽略不计。中子通过磁场区用的时间

$$\tau=\frac{l}{v}=\frac{ml}{k\hbar}$$

其中 v 是中子的速度,$k\hbar$ 是中子的动量。利用薛定谔绘景的变换算符,可将中子进入磁场区和出磁场区二个时刻的量子态相联系:

$$|\psi(t_0+\tau)\rangle_B=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}|\psi(t_0)\rangle$$

另一束中子不经过磁场,有

$$|\psi(t_0+\tau)\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\tau}|\psi(t_0)\rangle$$

图中二束中子有相位差

$$|\psi(t)\rangle_B=\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s\tau}|\psi(t)\rangle$$

令 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_B$,$\rho=\omega_c\tau\boldsymbol{e}_B$,$\omega_c=2g\frac{eB}{2mc}$,则

$$\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_s\tau}=\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}\rho\cdot\sigma}=\cos\frac{\rho}{2}-i\boldsymbol{e}_B\cdot\sigma\sin\frac{\rho}{2}$$

设磁场在 x 方向,则二束中子汇合处 D 的波函数强度为

$$I_D=|\psi+\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}\rho\hat{\sigma}_x}\psi|^2$$

如果调节 B 使得

$$\rho=\omega_c\tau=2\pi$$

即当极化矢量在磁场中由于进动而转了 2π,则磁场引起旋量波函数的相位改变为 π:

$$e^{-\frac{i}{2}\rho\hat{\sigma}_x}\psi=(\cos\pi-i\sin\pi\,\hat{\sigma}_x)\,\psi=-\psi$$

即 $I_D=0$。实验观察到干涉导致的强度极小。

七、多粒子系的量子力学 Quantum Mechanics on Multi-particles System

量子多体问题 quantum many-particle problem 量子多体系统的量子力学是单粒子量子力学的直接推广。设系统有 N 个粒子,波函数

$$\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,t)$$

代表 t 时测得第 1 个粒子位于 $\boldsymbol{x}_1$,同时第 2 个粒子位于 $\boldsymbol{x}_2$,等等的概率幅。多粒子位形空间的概率波的演化规律为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,t)$$

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{h}(i)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\hat{U}(i,j)$$

其中 $\hat{h}(i)$ 为第 i 颗粒子的单粒子哈密顿算符,$\hat{U}(i,j)$ 是 i 和 j 粒子的相互作用。ψ 的归一化

$$\int|\psi(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,t)|^2\mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\cdots\mathrm{d}^3x_N=1$$

由薛定谔方程,可导出相应的连续性方程,支持 ψ 可归一化。考虑自旋,则 $\boldsymbol{x}_i\rightarrow q_i(\boldsymbol{x}_i,S_3(i))$,

$$\int\mathrm{d}^3x_i\cdots\longrightarrow\sum_{S_3(i)}\int\mathrm{d}^3x_i\cdots。$$

全同粒子 identical particles 静止质量、电荷、自旋、磁矩和寿命等全部内禀属性都相同的微观粒子称为全同粒子。例如所有的电子都是全同粒子。粒子全同性概念与粒子态的量子化有本质的联系。经典物理中,由于宏观粒子的性质和状态(质量、形状等)可以连续变化,谈不上有真正的全同。即使两粒子的性质全同,由于它们在运动过程中有各自确定的轨道,所以总可以跟踪并区分它们。但对微观粒子而言,由于波粒二象性,不再存在轨道的概念,因此即使在初始时刻对各粒子加了标记,在时间的进程中它们是不可跟踪也因此是不可区分的,所以说全同性是微观粒子特有的属性。

全同粒子系的波函数 wave function of an identical particle's system 全同粒子是指所有内禀性质(如静质量,电荷,自旋,寿命等)都相同的微观粒子,可以是基本粒子如电子、质子、光子等,也可以是复合粒子如原子核、原子等作为一颗粒子看待。由全同粒子组成的多粒子体系叫全同粒子系。内禀性质完全相同的全同粒子,因有波动性而有不可区分性,因此全同粒子系的波函数对于任意两颗粒子交换必须具有对称性或反对称性,即粒子的概率分布(波函数模的平方)必须具有对称性,才能反映全同粒子的不可区分性。实践经验表明:凡是有零或整数自旋的粒子,其全同粒子系的波函数对于任意二个粒子的交换是对称的;凡是有半奇整数自旋的粒子,其全同粒子系的波函数对于任意二个粒子的交换是反对称的。

费米子 fermion 凡是具有半奇整数自旋的基本粒子或复合粒子,称为费米子。例如电子、质子、中子、μ 子、中微子、夸克以及复合粒子 ^{3}He 原子、氘原子、氚核等。由全同费米子组成的全同粒子系的波函数,对于任意二个粒子的交换是反对称的。因此,同一单粒子态上不能由二个以上粒子占据,这称为泡利不相容原理。由于波函数的反对称性,对库仑相互作用求平均时将出现交换能,这是形成化学共价键的关键因素。多电子原子的电子壳层结构和元素周期表的解释离不开泡利不相容原理;原子核的壳层结构也基于泡利不相容原理。费米子组成的系统遵从费米-狄拉克统计。

玻色子 boson 凡是具有零或整数自旋的基本粒子或复合粒子,称为玻色子。例如 π 介子、光子、胶子以及复合粒子氘核、氦核、^{4}He 原子等。由全同玻色子组成的全同粒子系的波函数,对于任意二个粒子的交换是对称的。容许大量粒子占据同一单粒子态。大量粒子占据零动量态的现象称为玻色-爱因斯坦凝聚。1995 年铷(^{87}Rb)原子气体用激光冷却到 100nK 以下,再加上磁场以造成势阱,此时观察到了玻色-爱因斯坦凝聚。全同玻色子组成

的系统遵从玻色–爱因斯坦统计。

泡利不相容原理 Pauli exclusion principle 不能有两个或两个以上的全同费米子处于同一个单粒子量子态，此即泡利不相容原理。泡利原理的提出使得许多原先无法解释的量子力学现象如元素周期表、反常塞曼效应等得到了完美的说明。该原理是在早期量子论的框架中提出来的，之后在量子力学发展中发现它是全同费米子系波函数反对称性的必然结果。

斯莱特行列式 Slater determinant 由于全同粒子的不可区分性，由二个或二个以上全同费米子组成的系统的任何可观测量必须具有坐标交换的不变性。由此要求全同费米子系的波函数有坐标交换的反对称性，即把任意二个粒子的坐标相互交换，波函数将改变它的符号。体现这种反对称性的简便方法是把有 N 个全同费米子的系统的波函数写成一个有 N 行和 N 列的行列式即斯莱特行列式。交换系统中任意两个粒子的坐标就相当于将该行列式中两个对应列相互交换，因而行列式改变符号，精确地体现了全同费米子系波函数的反对称性。

氦原子 helium atom 氦原子的原子序数 $Z=2$，原子核带 2 份正电荷，核外有二个电子。二个电子组成全同二体系统。氦原子的光谱存在二套光谱线系，可推断存在二套能级各自发生量子跃迁，由此历史上曾误认为存在二种氦原子，正氦和仲氦。通过量子力学对氦原子问题的求解，揭开了其中的奥秘，原来是自旋在其中扮演了重要角色。

忽略与自旋有关的能量，氦原子的哈密顿量

$$\hat{H}=\sum_{\alpha=1}^{2}\left(\frac{1}{2\mu}\hat{p}_{\alpha}^{2}-\frac{2e^{2}}{r_{\alpha}}\right)+\frac{e^{2}}{r_{12}}=\hat{H}_{0}+\frac{e^{2}}{r_{12}}$$

其中 $r_{\alpha}=|\boldsymbol{x}_{\alpha}|,\ r_{12}=|\boldsymbol{x}_{1}-\boldsymbol{x}_{2}|$

先求二个独立电子系统哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的本征值问题。不计与自旋有关的能量，轨道运动和自旋运动是分离变量的。每个独立单电子的轨道波函数都是 $Z=2$ 的类氢离子的波函数 ψ_{nlm}，相应的能量为 $\varepsilon_n=\frac{-e^2}{2a_0}\frac{4}{n^2}$。$\hat{H}_0$ 的基态能量为 $2\varepsilon_1$，低激发态能量为 $\varepsilon_1+\varepsilon_n(n\neq1)$。全同二体系的波函数，对于粒子交换是反对称的，考虑自旋变量，$\hat{H}_0$ 的基态和低激发态的波函数为：

$$\left.\begin{aligned}&\psi_{g}^{(0)}=\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)\chi_{00}\\&\psi_{1nsm_s}^{(0)}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2)\\&\qquad\pm\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)]\begin{matrix}\chi_{00}\\\chi_{1m_s}\end{matrix}\end{aligned}\right\}\quad(1)$$

其中 χ_{sm_s}是二个电子自旋合成的耦合基；χ_{00}是自旋单态；χ_{1m_s}是自旋三重态，$m_s=1,0,-1$；它们的表达式如下

$$\chi_{00}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\xi_+(1)\xi_-(2)-\xi_-(1)\xi_+(2)]$$

$$\chi_{11}=\xi_+(1)\xi_+(2)$$

$$\chi_{10}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\xi_+(1)\xi_-(2)+\xi_-(1)\xi_+(2)]$$

$$\chi_{1,-1}=\xi_-(1)\xi_-(2)$$

其中 $\xi_\pm$代表自旋朝上、下的自旋态。式(1)已满足粒子交换反对称要求，等价于计入了全同粒子的量子相互作用能量。在此基础上，$\frac{e^2}{r_{12}}$可作微扰处理。由微扰论求得能量：

(1)基态

$$E_g=-2\,\frac{4e^2}{2a_0}+J_g$$

$$J_g=e^2\iint d^3x_1d^3x_2\,\frac{|\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)|^2|\psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)|^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}$$

数值计算结果 $E_g=-2.75\,\frac{e^2}{a_0}$，和实验值 $-2.70\,\frac{e^2}{a_0}$基本一致。采用变分法计算，理论值和实验值符合得很好；

(2)低激发态

$$E_{nl}=\frac{-4e^2}{2a_0}\left(1+\frac{1}{n^2}\right)+J\pm K\qquad(2)$$

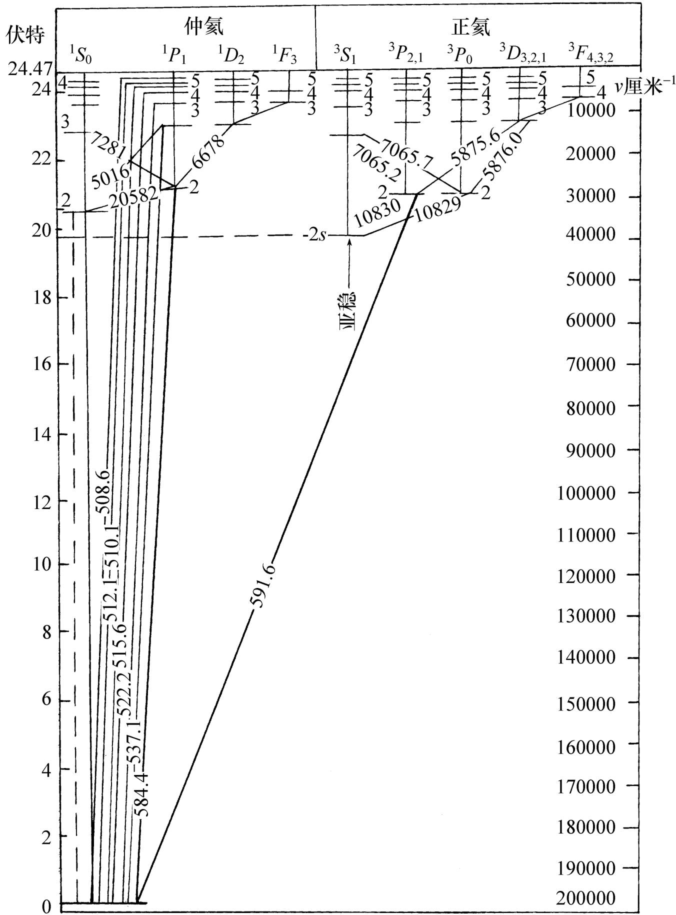
$$J=e^2\iint d^3x_1d^3x_2\,\frac{|\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)|^2|\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2)|^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}$$

$$K=e^2\iint d^3x_1d^3x_2\,\frac{\psi_{100}^{*}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}^{*}(\boldsymbol{x}_2)\psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|}$$

其 J、K 分别称为平均库仑能和交换能，它们的值均大于零且和角量子数 l 有关。对于自

旋单态 χ_{00}，式(1)的轨道运动波函数是对称的，式(2)中取$+K$；对于自旋三重态 χ_{1m_s}，式(1)的轨道运动波函数是反对称的，式(2)中取$-K$。对于粒子的靠近 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_2$，轨道对称波函数表明其概率比波函数未对称化时 $\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2)$的概率增大；轨道反对称波函数表明 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_2$ 的概率减少到零。这些因素是引起$\pm K$修正的原因。波函数的对称性质，等价地反映了全同粒子的量子力学相互作用。对于自旋单态和三重态，$\pm K$ 的不同产生$^1E_{nl}$和$^3E_{nl}$二套能级。对于电子跃迁，自旋磁矩不变，即有选择定则 $\Delta S=0$，故两套能级各自跃迁，形成两套氦光谱线系。如图，正氦的$^3S_1$能级虽比仲氦的$^1S_0$高，但由于受 $\Delta S=0$ 的限制而不发生跃迁，因此$^3S_1$能级成为亚稳态能级。

对氦原子的量子力学求解，虽然忽略了与自旋有关的能量，但由于自旋态的交换对称性质不同，直接影响到轨道态的对称或反对称组合，从而影响电子的概率分布和电子间的相互作用能量，即影响到氦原子的能量。



氦能级图

交换能 exchange energy 参见“氦原子”条。对于全同二体系统，忽略与自旋有关的能量和粒子间的相互作用 $V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)$，二个全同独立粒子(电子、核子)组成的全同粒子系的轨道运动波函数是二个单粒子波函数 $\psi_n^A(\boldsymbol{x}_1)$ 和 $\psi_m^B(\boldsymbol{x}_2)$ 的对称或反对称组合(取决于自旋波函数的对称性)。以 $V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)$ 作为微扰，则微扰引起的能量修正中出现交换能

$$K=\iint \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\psi_n^{A*}(\boldsymbol{x}_1)\psi_n^A(\boldsymbol{x}_2)V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2)\cdot\psi_m^{B*}(\boldsymbol{x}_2)\psi_m^B(\boldsymbol{x}_1)$$

交换能反映全同粒子的量子力学相互作用。仅当 $\psi_n^A(\boldsymbol{x})$ 和 $\psi_m^B(\boldsymbol{x})$ 都不为零的区域(波函数重叠区)才对交换能的积分有贡献。

交换能在分子结构、原子核物理、磁性理论等中均起着重要的作用。

氢分子 hydrogen molecule 氢分子由两个氢原子结合而成。当两个氢原子靠的很近时，两个氢原子的两个电子就处在两个氢原子核的共同作用之下。按照量子力学理论，电子是费米子，它们的波函数必须反对称。如果自旋部分反对称，则空间部分对称，如果自旋部分对称，则空间部分反对称。由于这种波函数对称性要求，两电子间的互作用能分为两部分，一是两电子之间的纯库仑能，另一部分就是交换能。在自旋部分对称而空间部分反对称时，交换能前取负号；在自旋部分反对称而空间部分对称时，交换能前取正号。交换能为

$$K=\iint \mathrm{d}^3x_1\mathrm{d}^3x_2\psi_{100}^{A*}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{100}^A(\boldsymbol{x}_2)\cdot\left(\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_{1B}}-\frac{e^2}{r_{2A}}\right)\psi_{100}^{B*}(\boldsymbol{x}_2)\psi_{100}^B(\boldsymbol{x}_1)$$

在计入核间互作用及各原子基态能量后发现：自旋平行时两氢原子间作用力恒为斥力，不可能结合成氢分子；当自旋反平行时，计入了交换能，两氢原子间的作用力可以形成稳定的氢分子。因此，交换能或相应的交换作用(交换力)对于两氢原子结合成氢分子的化学键(称共价键)是关键性的。总之，由于要求电子总波函数反对称，两电子自旋反平行时，空间部分取对称，使两电子处于两氢原子核之间的概率增加，此时形成氢分子。所以，共价键符号H∶H很形象化，但我们明白，这仅是概率上的意义。

二维电子气 two-dimensional electron gas 用量子限制等物理方法使电子群在一个方向(例如 Z 方向)上的运动被局限于一个很小的范围内，而在另外二个方向(x 和 y 方向)上可以自由运动的系统称为二维电子系。如果系统中电子密度较低，则称为二维电子气。由金属层–氧化半导体绝缘薄层–半导体薄层组成的夹心三层结构(MOS结构)，在垂直于表面方向加上电场后会在半导体和绝缘层的界面上形成反型层。反型层中的电子在垂直于层面方向被限制在一个小于 100Å(1Å$=10^{-10}$m)的尺度内运动，而在平行于层面方向可以自由地运动，所以就是一个二维电子气，反型层中电子的浓度可以用改变电场强度的方法来调控。二维电子气的能谱以 Z 方向运动的能级为起点(为带底)而形成能带结构，它的态密度(单位能量间隔中的状态数)，呈台阶状的倍增，这些特性使它在基础和应用研究中有广泛的运用，例如量子阱激光器，就是利用二维电子气的特性研制的。

哈特里–福克方程 Hartree-Fock equation 把多电子原子中的多电子的波函数近似写成各单粒子波函数的乘积，对相互作用多电子哈密顿量运用变分原理可以导出哈特里方程。哈特里方程实质上是一个平均场理论，即把所有其他电子对某电子的作用用一个平均场来代替，从而解出平均场作用下电子的能量和波函数，再将求得的较精确的能量和波函数代入平均场表达式，又得到新的平均场，如此周而复始可以最终求得自洽的单粒子能量和波函数。哈特里方程没有计及波函数的反对称性，实际就是略去了电子间的交换能，如果计及多电子波函数的反对称性，把多电子波函数写成斯莱特行列式，由此出发运用变分原理可以导得哈特里–福克方程。这一方程计及了电子间的交换能，因而是比哈特里方程更精确的研究多电子或其他多费米子系统的近似方法。

二次量子化 second quantization 将经典力学中的力学量 $A(x,p)$ 过渡成算符 $\hat{A}(\hat{x},\hat{p})$，并要求 $\hat{x}$, $\hat{p}$ 满足量子条件，这称为一次量子

化。进一步将波函数 ψ(或场量)当作算符$\hat{\psi}$，并满足一定的代数关系，称为二次量子化。这样做，使场相当于一个全同的多粒子系统。

福克表象 Fock representation 福克表象就是总粒子数没有限制的粒子数(单粒子态的占据数)表象。

对于角频率为 ω 的线性谐振子，$\hat{H}=\hbar\omega\cdot(\hat{n}+\frac{1}{2})$，其本征能量 $E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$的态可看做有 n 个量子(例如声子)的状态。记与 E_n 相应的本征矢为$|n\rangle$。由于粒子数算符$\hat{n}=\hat{b}^{+}\hat{b}$是厄米的，则其本征矢$|n\rangle(n=0,1,2,\cdots)$是正交归一的完备基(参考“线谐振子的代数解”条)：

$$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle,\ n=0,1,2,\cdots,\infty$$

$$\langle n|m\rangle=\delta_{nm}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|=1$$

以所有这些$|n\rangle$为基矢的表象称为福克表象，任意态$|\psi\rangle$可以展开：

$$|\psi\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

对于全同多粒子系，设单粒子态$|r\rangle$为一组完全集合$\hat{r}$共同的本征态，其标号 r 代表$\hat{r}$的一组本征值，将它们编号为 $1,2,3,\cdots$，则有$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}$，$\sum_{i}|i\rangle\langle i|=1$。多粒子系统的态空间是所有单粒子态空间的直积。由于全同粒子的不可分辨性，设第 i 单粒子态上的占据数为 n_i，(对玻色子系，n_i 任意；对费米子系，$n_i=0,1$)则

$$|n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots,n_\infty\rangle$$

代表各单粒子态上有确定粒子数分布 n_i 的多粒子系统的态，以这些态矢为基的表象是福克表象。系统的任意态$|\psi\rangle$[其波函数对粒子的交换是对称的(玻色子)或反对称的(费米子)]可如下展开：

$$|\psi\rangle=\sum_{n_1 n_2\cdots n_\infty}|n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots,n_\infty\rangle\langle n_1,n_2,\cdots,n_i,\cdots,n_\infty|\psi\rangle$$

八、量子力学的新词汇
New Words in Quantum Mechanics

量子尺寸效应 quantum size effect 根据量子力学原理，随着限制微观粒子(例如电子)运动的空间尺寸不断减小，其量子现象更加明显。

量子限制效应 quantum confinement effect 微观粒子能量的量子化现象随着其空间运动限制尺寸不断减小而更加明显，由连续的能带变为分立的能级，特别是基态能级向上移动，发生蓝移。对固体中电子运动而言，空间尺寸达到纳米量级时，其量子效应变得明显，因而通常称此为低维结构或纳米结构。

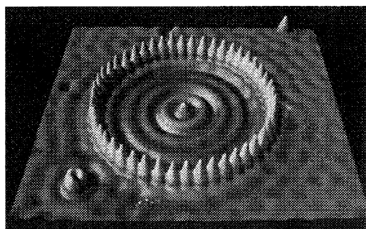
量子阱 quantum well 当微观粒子(例如电子)的运动在某一维度上受到限制，进而显示出明显的量子效应。20 世纪 70 年代，人们提出应用两种性质不同的材料以薄膜的形式交替生长，宽能带的材料形成势垒，窄能带的材料形成势阱，电子的运动被限制在阱中，通常将这种具有结构周期性的材料称为超晶格。

量子线 quantum wire 微观粒子(例如电子)的运动在二个维度上受到限制，仅在一个维度上运动未受限制。

量子点(量子箱) quantum dot 微观粒子(例如电子)的运动在三个维度上均受到限制，其能级变为孤立，同时由于电容的减小而出现库仑阻塞效应，电荷的输运也发生量子化，称为单电荷(电子)过程。

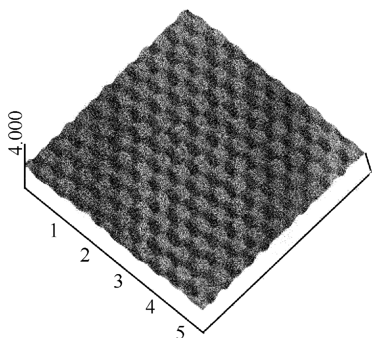
扫描隧道显微镜 scanning tunneling microscope(STM) 扫描隧道显微技术是最早发展起来的一种扫描探针显微技术。第一台扫描隧道显微镜是 1982 年 IBM 苏黎世实验室的葛·宾尼(Gerd Binning)和海·罗雷尔(Heinrich Rohrer)及其同事研制成功的。因此 1986 年宾尼和罗雷尔被授予诺贝尔物理学奖。扫描隧道显微的基本原理是利用量子理论中的隧道效应和计算机数据处理对导电样品表面进行成像和物性研究。将原子尺度的极细针尖与

被研究表面作为两个电极,当样品与针尖非常接近时(通常小于 1nm),在外加电场的作用下,电子会穿过两个电极之间的势垒流向另一电极(即隧道效应)。隧道电流 I 是电子波函数重叠的量度,它与针尖和样品之间的距离 S 和平均功函数 Φ 有关:$I \propto V_b \cdot \exp(-A\Phi^{1/2}S)$,其中 V_b 是加在针尖和样品之间的偏压,平均功函数 $\Phi \approx \frac{1}{2}(\Phi_1 + \Phi_2)$,$\Phi_1$ 和 Φ_2 分别为针尖和样品的功函数,A 为一常数,在真空条件下约为 1。由该表达式可见隧道电流强度对针尖-样品表面之间的距离非常敏感。如果距离 S 减小 0.1nm,隧道电流 I 将会增加一个量级。在恒电流工作模式下,利用电子反馈电路控制隧道电流恒定,并通过计算机控制压电陶瓷使针尖在样品表面扫描,探针在垂直样品表面方向上的高低变化的轨迹就反映出样品表面的形态。除了恒电流工作模式外,对于表面起伏较小的样品,还可以保持针尖和样品之间的距离不变,利用隧道电流的变化对表面形貌和物性成像。扫描隧道显微的特点是具有原子量级高分辨率,并可在大气、真空、溶液等环境下实时的得到实空间中导电物体表面的三维图像。配合扫描隧道谱(Scanning Tunneling Spectroscopy,STS)可以得到有关表面不同层次的态密度、电荷密度波、表面势垒的变化和能隙结构等信息。近年来人们利用扫描隧道显微技术研究特殊条件下的电输运问题和宏观量子效应,如库仑阻塞效应等;或将探针作为微电极置于纳米点或纳米器件上,测量纳米点或纳米器件的电学特性。如图,Don Eigler 及其同事利用扫描隧道显微镜在铜表面上将 48 个铁原子搬运排成的一个圆栅。铜的表面电子被禁锢在铁原子栅中并被铁原子栅反射形成同心圆驻波。



原子力显微镜 atomic force microscope 原子力显微技术是扫描探针显微家族中应用较广的一种显微技术。它是 1986 年由 G. Binning, C. F. Quate 和 C. Gerber 等发明的。其原理是将一个对微弱力极其敏感的微悬臂的一端固定,另一端有一尖锐的针尖。当原子力显微镜工作在接触模式时,针尖与样品接触并扫描样品表面。由于针尖尖端的原子与样品表面原子之间存在极微弱的排斥力,在扫描时通过控制这种力恒定,带有针尖的微悬臂将对应于针尖和样品表面原子间作用力的等位面而在垂直于样品的表面方向起伏运动。利用光杠杆原理可以检测到微悬臂对应于扫描各点的位置变化,从而获取样品表面的形貌。对软物质表面的显微通常使用敲击(tapping)模式以避免样品表面被针尖损伤。当原子力显微系统工作在敲击模式时,微悬臂被强迫在其共振频率(通常为几百 kHz)附近振动。当针尖和样品之间的距离减小时,悬臂振动的振幅、位相和谐振频率发生变化。变化的幅度被用来反馈控制针尖和样品的距离。在扫描样品表面时利用振幅、位相和谐振频率的变化等信息进行成像。原子力显微技术是综合了力学、光学、电子学和计算机信息处理的新型显微技术,它除了具有很高的空间分辨率外,还具有被检测样品不需要导电、可在大气、真空、溶液等环境下实时的得到表面的三维图像等特点。在原子力显微镜的基础上,人们又发展了磁场力显微镜、电场力显微镜,等等。近年来原子力显微技术已从开始时的高分辨率形貌检测手段逐渐发展成具有高空间分辨率的表面微加工和表面微区物性测量工具。其主要方法是利用针尖引起的局域化的高强度力场、电场、磁场等对样品表面进行物理修饰或诱导化学反应,从而达到表面微加工的目的。如在针尖上覆盖一层导电层并在针尖和样品间加上一偏压,在针尖的局域强电场下,利用场致氧化效应或场致蒸发效应可制作特定纳米结构;针尖的电场还可实现局域的铁电、介电材料的极化,制备特定的电畴结构,并实时研究其运

动、反转等物理过程。



利用原子力显微镜观测到的云母表面的原子结构图

相干态　coherent states　相干态是希尔伯特空间中满足下列最低要求的态矢簇：矢量 $|l\rangle$ 是标号 l 的强连续函数；在标号空间存在正测度 δl，使得单位算符可作分解：

$$1=\int |l\rangle\langle l|\delta l$$

式中积分遍及整个标号空间。

下面介绍一类最原始而又最广泛应用的正则相干态（谐振子相干态）。对于线性谐振子，$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，引入互为厄米共轭的湮没和产生算符

$$\hat{b}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}+\mathrm{i}\hat{p})$$

$$\hat{b}^+=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}-\mathrm{i}\hat{p})$$

其逆变换

$$\hat{p}=\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{b}^+-\hat{b})$$

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{b}^++\hat{b}) \qquad (1)$$

由 $\hat{x}$，$\hat{p}$ 满足的量子条件，得到

$$[\hat{b},\hat{b}^+]=1 \qquad (2)$$

将 $\hat{x}$，$\hat{p}$ 的表示式(1)代入

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}mx^2,$$

并应用式(2)，得到

$$\hat{H}=\hbar\omega[\hat{b}^+\hat{b}+\frac{1}{2}]=\hbar\omega[\hat{n}+\frac{1}{2}]$$

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{H},\hat{b}]=-\hbar\omega\hat{b}\\&[\hat{H},\hat{b}^+]=\hbar\omega\hat{b}^+\end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

其中 $\hat{n}=\hat{b}^+\hat{b}$ 是厄米（自伴）算符，其本征矢 $|n\rangle$ 满足

$$\hat{n}|n\rangle=n|n\rangle,\ n=0,1,2,\cdots$$

$$\hat{H}|n\rangle=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega|n\rangle$$

$$\langle n'|n\rangle=\delta n'n$$

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=1$$

利用式(3)，可得到

$$\begin{aligned}\hat{b}|n\rangle&=\sqrt{n}|n-1\rangle,\ \hat{b}^+|n\rangle\\&=\sqrt{n+1}|n+1\rangle\end{aligned} \qquad (4)$$

求湮没算符的本征矢量 $\hat{b}|z\rangle=z|z\rangle$，由于 $\hat{b}$ 不是厄米的，其本征值 z 是复数，且 $\langle z|z'\rangle\neq0$，将待求的 $|z\rangle$ 用完备基 $|n\rangle$ 展开

$$|z\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}C_n|n\rangle,\ C_n=\langle n|z\rangle$$

利用式(4)：$\hat{b}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ 和 $\hat{b}|0\rangle=0$，则由 $\hat{b}|z\rangle=z|z\rangle$ 得到

$$\sum_{n=1}^{\infty}\sqrt{n}C_n|n-1\rangle=z\sum_{n=0}^{\infty}C_n|n\rangle$$

即 $\sqrt{n}C_n=zC_{n-1}$，递推得

$$C_n=\frac{z^n}{\sqrt{n!}}C_0$$

$$|z\rangle=C_0\sum_n\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

由归一化条件 $\langle z|z\rangle=1$，得 $C_0=\mathrm{e}^{-|z|^2/2}$，即有

$$\begin{aligned}|z\rangle&=\mathrm{e}^{-|z|^2/2}\sum_n\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\\&=\mathrm{e}^{-|z|^2/2}\mathrm{e}^{zb^+}|0\rangle\end{aligned} \qquad (5)$$

$$\langle z'|z\rangle=\mathrm{e}^{-|z'-z|^2}$$

选用 z 的极坐标，不难证明相干态有超完备性

$$\int \frac{d^2 z}{\pi} |z\rangle\langle z| = 1$$

于是可作为表象使用。任何态$|\psi\rangle$可用相干态$|z\rangle$展开：

$$|\psi\rangle = \int \frac{d^2 z}{\pi} |z\rangle\langle z|\psi\rangle$$

不难检验$|z\rangle$满足相干态的定义。容易计算粒子数算符$\hat{n}=\hat{b}^+\hat{b}$在相干态的平均值。

$$\langle z|\hat{n}|z\rangle = |z|^2$$

在相干态$|z\rangle$中出现 n 个粒子的概率，根据式(5)为

$$|\langle n|z\rangle|^2 = e^{-|z|^2}\frac{|z|^{2n}}{n!}$$

对相干态，有最小不确定度 $\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2}$（参见“压缩态”条）。

压缩态 squeezed state 压缩态是相干态的推广。对线性谐振子的产生和湮没算符($\hat{b}^+$和$\hat{b}$，$[\hat{b},\hat{b}^+]=1$)作幺正变换

$$\hat{a} = \lambda\hat{b} + \nu\hat{b}^+$$

$$\hat{a}^+ = \lambda\hat{b}^+ + \nu\hat{b}$$

其中 λ、ν 是实数，满足 $\lambda^2-\nu^2=1$。容易验证：

$$[\hat{a},\hat{a}^+] = [\lambda\hat{b}+\nu\hat{b}^+, \lambda\hat{b}^+ + \nu\hat{b}] = 1$$

这表明从$\hat{b}$、$\hat{b}^+$到$\hat{a}$、$\hat{a}^+$的变换不改变代数性质，是幺正变换。对于 $\lambda=1,\nu=0$，则$\hat{a}=\hat{b}$，$\hat{a}^+=\hat{b}^+$。$\hat{a}$的本征态$|\alpha\rangle$满足

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

$|\alpha\rangle$被称为压缩态。这是由于位置 x 的不确定度 Δx，在$|\alpha\rangle$态可以比相干态($\hat{b}$的本征态)$|z\rangle$有所压缩。可以证明在压缩态有

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}|\lambda-\nu|$$

$$\Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}|\lambda+\nu|$$

$$\Delta x\Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

而对于相干态($\lambda=1,\nu=0$)$\Delta x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$，$\Delta p=\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}$，二者都是固定的。在满足 $\lambda^2-\nu^2=1$ 的条件下，可以调节 λ 和 ν 的值，使 Δx 压缩到很小。

纠缠态表象 entangled-state representation 1935 年，Einstein，Podolsky 和 Rosen(EPR)联名发表了一篇关于 EPR 佯谬的著名论文。这篇重要文献事实上引进了量子力学的两个重要方面：量子纠缠和量子非局域(量子不可分性)。一个复合体系的量子态纠缠是量子力学的显著特征，它与经典的思想路线完全背离。具体地说，考虑一个由空间上分开的两个子系统组成的系统，其态矢量为

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} c(a,b)|a\rangle|b\rangle, \quad (1)$$

其中$|a\rangle$($|b\rangle$)为子系统 1(2)的正交矢量集合。如果 $c(a,b)$不能因式分解为 $f(a)\times g(b)$的形式，则 $|\Psi\rangle \neq \sum_a f(a)|a\rangle \otimes \sum_b g(b)|b\rangle$。根据 Schrödinger，这样的(二粒子)态就称(二粒子)纠缠态。

对二粒子体系，有两类最大纠缠态：EPR 的连续变量纠缠态和 EPR 纠缠态的 Bohm 版(如二粒子自旋单态)。EPR 纠缠态是二粒子相对坐标 Q_1-Q_2 和总动量 P_1+P_2 的共同本征态，其在 Fock 空间的显式由范洪义等首次给出：

$$|\eta\rangle = \exp[\frac{1}{2}|\eta|^2 + \eta a_1^+ - \eta^* a_2^+ + a_1^+ a_2^+]|00\rangle, \quad (2)$$

其中 $a_{1,2}^+=(Q_{1,2}-iP_{1,2})/\sqrt{2}$为通常的产生算符，$|00\rangle$为真空态。容易验证，$|\eta=\eta_1+i\eta_2\rangle$满足

$$(Q_1-Q_2)|\eta\rangle = \sqrt{2}\eta_1|\eta\rangle,$$

$$(P_1+P_2)|\eta\rangle = \sqrt{2}\eta_2|\eta\rangle。 \quad (3)$$

公式(3)显示，$|\eta\rangle$确实是 Q_1-Q_2 和 P_1+P_2 的共同本征态，它明显描写一个 100%关联的二粒子体系。范洪义应用有序算符内的积分技术证明了$|\eta\rangle$满足如下关系：

$$\langle\eta'|\eta\rangle = \pi\delta^{(2)}(\eta-\eta'), \int\frac{d^2\eta}{\pi}|\eta\rangle\langle\eta| = 1。 \quad (4)$$

公式(4)表明$|\eta\rangle$构成一正交完备表象。因为$|\eta\rangle$就是 EPR 纠缠态,故可称其为纠缠态表象。为显示$|\eta\rangle$的纠缠,可将其写成

$$|\eta=(r+is)/2\rangle$$
$$=\int \mathrm{d}u\exp(iru)|s+r/2\rangle_1|s-r/2\rangle_2, \quad (5)$$

其中$|s\rangle_{1,2}$为粒子 1 和 2 的坐标本征态。对照(1)可看出式(5)不能因式分解,因而$|\eta\rangle$是一个纠缠态。Q_1+Q_2和P_1-P_2的共同本征态亦可类似得到。它们构成另外一个纠缠态表象。

EPR 纠缠态及其 Bohm 版不但具有重要的理论意义,在新兴的量子信息论(如远程传送,量子计算,量子通讯)中还有着重要的实际应用价值。离散变量及连续变量的量子远程传送的理论研究及其实验实现均有赖于 EPR 纠缠。现已实现的连续变量的量子远程传送就利用了双模压缩真空态纠缠。双模压缩真空态定义为

$$|\lambda\rangle=\exp[\lambda(a_1^{+}a_2^{+}-a_1a_2)]00\rangle$$
$$\equiv S(\lambda)|00\rangle, \quad (6)$$

它可以由光学参量下转换过程产生。需要着重指出,这一重要的纠缠态在一定参数范围内可显示量子非局域性。范洪义等利用纠缠态表象把双模压缩算符 $S(\lambda)$写成

$$S(\lambda)=\mu^{-1}\int\frac{\mathrm{d}^2\eta}{\pi}|\eta/\mu\rangle\langle\eta|$$
$$(\mu=\exp(\lambda))。\quad (7)$$

公式(7)从另一侧面显示了$|\eta\rangle$的纠缠特性。

范洪义进一步的工作显示,纠缠态表象具有很多优美的应用,如应用于两模相算符,热场动力学,构造新表象及纠缠 Winger 算符,求解二体动力学问题等。有趣的是,对均匀磁场中的带电粒子,其 x 与 y 坐标(或相应的正则动量)算符的共同本征态恰好也构成 EPR 纠缠态表象。陈增兵(中国科学技术大学)

非线性薛定谔方程 nonlinear Schödinger (NLS) equation 通常的(线性)薛定谔方程不仅具有明确的量子力学意义,而且还能描述各种弱色散缓慢调制波动,其计及量子或经典弱非线性效应后的各种修正形式即为 NLS 方程。典型的 NLS 方程仅含立方非线性项

$$i\Psi_t+\Psi_{xx}\pm2|\Psi|^2\Psi=0。$$

它也具有上述线性情况下的双重意义,例如在量子力学中 Ψ 可代表弱互作用非理想玻色气体的凝聚波函数,而在经典波动意义下 Ψ 则可代表深水表面波、Langmuir 等离子体波及 Kerr 介质中超短脉冲光波之调制波幅。因其色散与非线性效应得以微妙平衡——更严格说,在 Hamilton 意义下是完全可积的,上方程可用反散射法求解,其任意初值条件解均渐近于纯孤立波解,这些孤波在互作用后终将散开且以原来形状和速度再现,故命名为孤子。对应于式中正或负号的孤子称为呼吸子或扭折子,依其光学意义又称为亮孤子或暗孤子。

量子动力学问题与经典动力学问题间的对应 correspondence between quantum and classical dynamical problems 在量子力学发展初期,人们面对着一系列全新的实验事实如波粒二象性等,意识到已进入了经典力学不完全适用的范围,必须突破经典力学原来的框架,去发展新的量子力学。但同时也意识到在经典力学适用范围内,经典力学依然是正确的相对真理。新的量子力学是对于客观规律的进一步的认识,但与原来的经典力学之间仍应有明确的对应关系。基于这样的思考,尼·玻尔很早就提出了对应原理。即使玻尔没有对他的对应原理给出精确的表述,但这一有深刻意义的思想对量子力学的创建仍然起到了决定性的作用。虽则由于历史条件,对某些问题如量子动力学中的初始态问题未能很好解决,使得在一个时期内量子力学不能像经典力学那样,按因果关系去理解自然界的事件在空间时间中的演化过程,20 世纪中叶以后,经典混沌运动的研究的成就,又重新唤起了人们对于这一问题的注意。而今,在新的历史条件下,再来审视这一问题,可以看到这一问题是能够解决的。

为方便起见,对量子力学的基本框架先就运动学和动力学两方面分开讨论。在运动学描述体系方面,的确作了实质性的改动。对应于经典力学中一对对基本共轭变量 $\boldsymbol{q}_i$, $\boldsymbol{p}_i$,在量子力学中是相应的不能互易的线性算子,它们作用于线性空间中的态,而且这种量子态是具

有概率涵义的。线性算子、线性空间中的态和态的概率涵义三者是不可分割的，它们结合在一起才能给出具有经典对应的期望值。它们各自的性质是彼此关联着的，是根据一系列全新的实验事实而提出来的。当然，也要尽可能地考虑到与经典有关性质的对应。因为经典力学中一对对基本共轭变量必须都满足基本泊松括号，量子力学中一对对基本共轭变量的相应的不可互易的线性算子必须都满足相应的量子形式的基本泊松括号。具有概率涵义的态$|\psi\rangle$，只要表为

$$\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi| \tag{1}$$

也立刻与经典力学中的概率密度函数相对应

$$1=Tr[\hat{\rho}]=\langle\psi|\psi\rangle \tag{2}$$

$$\bar{A}=Tr[\hat{A}\hat{\rho}]=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{3}$$

$\hat{\rho}$究竟还应有什么样的性质，仅仅从运动学描述角度考虑是不够的，还必须从动力学角度去考虑。运动学与动力学也是不能截然分割的。现在应先承认$\hat{\rho}$在动力学中也得有它的经典对应，就是说式(3)中的$\bar{A}$将是t的函数$\bar{A}(t)$。

在动力学中，$\bar{A}(t)$随t的变化可由两种绘景给出，在海森伯绘景中，$\hat{A}$随t变化，而$\hat{\rho}$不随t变化，于是给出了动力学方程

$$\frac{d\hat{A}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}(\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A});$$

$$\hat{A}(t=0)=\hat{A}^{\circ} \tag{4}$$

称为海森伯方程。在薛定谔绘景中，$\psi(t)$随t变化，而$\hat{A}$不随t变化，于是给出了动力学方程

$$\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=\frac{1}{i\hbar}(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H}),\quad \hat{\rho}(t=0)=\hat{\rho}^{\circ} \tag{5}$$

或 $$i\hbar\frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t}=\hat{H}|\psi\rangle,$$

$$|\psi(t=0)\rangle=|\psi^{\circ}\rangle$$

前者称为诺伊曼方程，后者称为薛定谔方程。因为有式(1)所示的$\hat{\rho}=|\psi\rangle\langle\psi|$，诺伊曼方程和薛定谔方程二者是等价的。

海森伯方程和经典力学中的哈密顿方程相应，诺伊曼方程则和经典力学中的刘维尔方程相应。今已知在经典力学中，如能通过正则变换将基本共轭变量p,q化为作用量、角变量I,θ，同时使系统的哈密顿量化为只含作用量I而与角变量θ无关的形式，则有关的哈密顿方程显然是可积的，相应于初始条件$I(t=0)=I^{\circ}$，$q(t=0)=\theta^{\circ}$的解为

$$I(t)=I^{\circ},\theta(t)=\theta^{\circ}+\omega(I^{\circ})t,\omega(I)=\frac{\partial H(I)}{\partial I}\Big|_{I=I^{\circ}} \tag{6}$$

运动总是规则的。用刘维尔方程来讨论时，则应将初态ρ°取为相点I°,θ°附近的δ-函数型的概率密度分布。在规则运动情形，相点轨迹对于初始条件的微小变动是稳定的，在演化过程中，$\rho(t)$将仍取δ-函数型的概率分布，在极限条件下逼近哈密顿方程所给出的结果。但如果系统受到扰动，动力对称性约束已经丧失，不能再像原来那样化为只含作用量的形式，则虽取原来那样的初始条件，也不能给出原来那样的解。扰动足够强时，运动将是极不规则的混沌运动。动力学方程中的哈密顿量的整体性质与初态的整体性质是否一致，对于所给出的反映演化过程的解，有极为重要的关系。根据关于量子力学基本框架的分析来看，在量子情形也必然会给出与经典情形相对应的结果。

近期的研究工作已具体论证了这一点。第一、经典力学中关于可积性的刘维尔定理，只是通过正则变换来明白显示系统哈密顿量与角变量无关的动力对称性，所涉及的由泊松括号来表述的李代数不同实现形式间的变换与变换后的哈密顿量具有的动力对称性的李代数特征，都有明确的量子经典对应，故这一刘维尔定理对于相应的量子情形同样适用。第二、通过反映哈密顿量的动力对称性的李代数和李群，指出了哈密顿量的态空间与它的动力对称性群的表示空间之间的联系。因为不论经典情形或量子情形，都会存在这样的联系，所以也就指出了量子态空间和经典态空间之间的对应。第三、在量子力学中，哈密顿量的基态虽与经典力学中的静平衡态不同，具有零点涨落，但指出了它是具有最小不确定度的态，于是通过动力对称性群的不同元素的作

用,给出了与经典相点一一对应的具有最小不确定度的量子态。这样,通过运动学和动力学的统一考虑,在严格考虑不确定性原理的前提下,给出了量子态空间与具有最小不确定的特殊量子态的各自的量子经典对应。

在上面的讨论中,量子经典对应是通过含普适普朗克常数 $\hbar$ 的量子泊松括号来实现的。因此,在求解量子动力学方程时,必然要涉及表述一对对基本共轭变量的不可互易的算子间的量子泊松括号,必然会在所得到的动力学方程解中显示出不可避免的量子效应。因此,关于量子经典对应还应作进一步的考虑。

就简单可积量子系统例如三维各向同性的谐振子而言,哈密顿量中只含两个参量,一个是质量 m_0,另一个是势参量 k_0,连同普适普朗克常数 $\hbar$,共有三个量。这里一共涉及三个基本动力学量 p, q 及 t,可以对它们作合适的标度变换,使动力学方程及量子泊松括号中不再出现 m_0, k_0 及 $\hbar$。但如果考虑同一类三维各向同性谐振子,它们具有相同的 k_0,但有不同的 m。比较研究它们的量子效应的强弱时,也应作合适的标度变换。但因为只有三个基本动力学量单位,故动力学方程及量子泊松括号中必然会出现一个与 $\frac{m_0}{m}$ 有关的可变量。如果使动力学方程都化为完全相同的形式,则量子泊松括号将化为如下形式,

$$\hat{q}_j\hat{k}_k-\hat{p}_k\hat{q}_j=i\sqrt{\frac{m_0}{m}}\delta_{jk} \qquad (7)$$

$\sqrt{\frac{m_0}{m}}$ 扮演着等效普朗克常数的角色,显然,随着 m 对于 m_0 的相对值的逐渐变大,量子效应逐渐变弱。运用类似的考虑,还可以对其他更复杂的可积的以至不可积的同类量子系统都用等效普朗克常数的大小来概括地表述它们的量子效应的强弱。这样,使得关于量子经典对应的考虑有了一个量化的标准。当等效普朗克常数逐渐变小时,量子系统的离散能谱逐渐逼近于经典情形中的连续能谱,而量子可积系统的具有最小不确定度的特殊的量子态则逐渐逼近于相应的经典情形中的 δ-函数型的概率分布。

在上面的讨论中,从包括动力学方程和初始条件在一起的量子动力学问题的要求出发,依据动力学对称性这一类属性特征从理论上给出了与之紧密联系的、且具有经典对应的最小不确定度态。不仅如此,近年来实验技术的发展,使得能将微观粒子捕入势阱,再进一步将其冷却,从实践上提供了制备这种最小不确定度态的可能。所以在量子力学现有框架内,像经典情形,完整地考虑量子动力学问题,不仅具有理论的而且还具有实践的意义。很显然这样的量子动力学问题决不能因为其中的动力学方程是线性的而把整个动力学问题看成是一个线性问题。由于量子与经典动力学问题间的明确地存在着对应,它们各自给出的结论也必然有明确的对应。

量子计算机 quantum computer 这是尚处于论证和研制过程中的下一代计算机之一。根据量子态的叠加原理,人们设想可用于设计计算机的并行运算,从而提高计算机的运算速度,估计可提高一亿倍。电子计算机以数字“0”与“1”表示电路的“断”与“开”;而量子计算机以量子态作为信息载体,例如以电子自旋态(朝上和朝下)表示“0”和“1”。相当于经典计算机以“硅基”构成硬件;需要找到物理体系起量子计算机的硬件作用。目前,量子计算机正处于找到“硅基”的前夕。科学家们已在核磁共振、离子阱、光枪等体系上最多做到 7 个存储器。我国已成功实现两比特量子逻辑门(存储器),这表明我国的量子计算机研究也已进入实验研究阶段。

在量子力学中,由于系统与测量仪器相互作用,量子态发生“编缩”, $\psi=\sum_n C_n\psi_n\rightarrow C_n\psi_n$,从而消相干(破坏并行运算)。这成为阻碍量子计算机实际应用的主要障碍。

Quantum Field Theory
量子场论

量子场 quantum field 量子场是描述微观对象高速运动规律的有效概念。它是物质存在的一种形式。它既反映微观对象的波动性，又反映它的粒子性，使场的广延性和粒子的定域性得到统一。场量是满足特定代数关系的算符，与时空坐标和自旋分量等内禀坐标有关。一般用不同的量子场来描写不同种类的基本粒子。量子场的激发表示粒子的产生，不同的激发态代表处在各种不同状态下的基本粒子系统。量子场激发的消失代表粒子的湮灭。随着量子场的理论的发展，它已经不仅用来描写基本粒子，而且也被广泛应用于凝聚态物理中，用来研究各种元激发的演化规律。

作用量 action 和经典力学类似，人们把量子场的拉格朗日函数密度 $\mathscr{L}$ 对时空的积分叫做该量子场的作用量：$S=\int \mathscr{L}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t$。由最小作用量原理可以得到相应的场方程，即可以由作用量在固定边界条件下取极值 $\delta S=0$ 得到场方程。其中拉格朗日函数密度 $\mathscr{L}$ 是场量及它对时空的一阶导数的函数。

等效作用量 effective action 以等效拉格朗日函数密度 $\mathscr{L}_{\mathrm{eff}}$ 表示的作用量叫等效作用量。

$$S_{\mathrm{eff}}=\int \mathscr{L}_{\mathrm{eff}}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}t。$$

在不同理论中，等效作用量是不同的。

非阿贝尔规范场的等效拉格朗日函数密度 effective Lagrangian density for non-Abelian gauge fields 对于非阿贝尔规范场理论，为了消除规范空间积分带来的无穷大，必须用规范固定项来表示规范的适当选取，相应的拉格朗日为 $\mathscr{L}_{\mathrm{FG}}$ 叫做规范固定拉格朗日函数密度。而对规范固定项的补偿，必须用格罗斯曼标量场的积分才能表示成等效拉格朗日函数密度的形式，（这就是法狄耶夫-波波夫鬼场项 $\mathscr{L}_{\mathrm{FPG}}$）。因此，在路径积分量子化理论中，其拉格朗日函数密度就要在原有的拉格朗日密度上增加相应的规范固定项和鬼场项，这就是非阿贝尔规范场的等效拉格朗日密度。

$$\mathscr{L}_{eff}=\mathscr{L}_0+\mathscr{L}_{\mathrm{FG}}+\mathscr{L}_{\mathrm{FPG}}=\mathscr{L}_0+\frac{1}{2\alpha}F^2-\bar{\eta}^{\mathrm{a}}M_{ab}\eta^{\mathrm{b}}。$$

其中 $M=\det\left(\frac{\delta F^{\alpha}(x)}{\delta\omega^{b}(y)}\right)\Big|_{\omega=0}$，$F$ 是规范场的某种函数 $F=F(A_{\mu})$。

最小作用量原理 principle of least action 场的最小作用量原理可以表述如下：对于定义在时空坐标为变量的某种量子场 $\phi(x,y,z,t)$，它的运动方程由它的作用量取极值来决定：$\delta S=0$。例如对于标量场 $\phi(x,y,z,t)$，

$$\sum_{\mu=l}^{4}\frac{\partial}{\partial x_{\mu}}\frac{\partial L}{\partial\frac{\partial\phi}{\partial x_{\mu}}}-\frac{\partial L}{\partial\phi}=0。$$

其中拉格朗日函数密度 $\mathscr{L}$ 是场量及其对时空导数的函数：

$$\mathscr{L}=\mathscr{L}\left(\phi,\frac{\partial\phi}{\partial x_1},\frac{\partial\phi}{\partial x_2},\frac{\partial\phi}{\partial x_3},\frac{\partial\phi}{\partial x_4}\right)$$

这里 x_1,x_2,x_3 是空间坐标，$x_4=it$，t 是时间坐标。

绝热假设 adiabatic hypothesis 这是一个关于计算散射截面时的假设。假定在散射过程中，在入射粒子上加上和除去外势作用的速度是很慢的，并在 $t=\pm\infty$ 时 $V=0$。因为如果速度太快，这意味着，通过傅里叶变换，势能对时间的依赖关系将导致散射中心的能量发射和吸收。

群的伴随表示 adjoint representation of group 以群的结构常数表示的生成元的元素的表示形式叫群的伴随表示。以 SU(2) 群为例，群的生成元可以表示为

$$I_1=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\ I_2=\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix},$$

$$I_3=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$$

其矩阵元可以用 Levi-Civita 符号 ε_{imn} 表示为 $(I_{\mathrm{i}})_{mn}=-\mathrm{i}\varepsilon_{imn}$，也可以用群结构常数 C_{ijk} 表

示：$(I_i)_{mn}=C_{imn}$。以结构常数 C_{ijk}表示的生成元的元素的表示形式叫群的伴随表示。这些元素满足下列关系

$$C_{lim}C_{mjk}+C_{ljm}C_{mki}+C_{lkm}C_{mij}=0。$$

湮没实验 annihilation experiments　当两个被加速了的正负粒子相碰撞时，将发生湮没反应，即它们湮没成为虚光子，后者又根据其能量动量守恒和其他守恒定律转变为其他粒子，如各种轻子 $e^+,e^-,\mu^+,\mu^-;\tau^+,\tau^-$等等。也可以变成各种重子：$e^++e^-\to q+\bar{q}\to$各种重子。例如北京的正负电子对撞机即是一台能量可达 2.4GeV 的正负电子对撞机，可以产生能量小于 4GeV 的粒子，如著名的 J/Ψ 粒子。

湮没算符和产生算符 annihilation operator and creation operator　作用在系统基态上本征值等于零的算符叫湮没算符。

对于标量场，量子场理论中湮没算符部分通常用 $a(\boldsymbol{k})$来表示，有 $a(\boldsymbol{k})|0\rangle=0$。而作用在系统基态上等于 1 的算符叫产生算符，通常用 $a^+(\boldsymbol{k})$表示，有 $a^+(\boldsymbol{k})|0\rangle=1(\boldsymbol{k})|0\rangle$。产生算符和湮没算符满足下列对易关系：

$$[a(\boldsymbol{k}),a^+(\boldsymbol{k}')]=(2\pi)^3 2\omega_k\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$[a(\boldsymbol{k}),a(\boldsymbol{k}')]=0,[a^+(\boldsymbol{k}),a^+(\boldsymbol{k}')]=0。$$

对于旋量场，上述对易关系应代之以反对易关系，同时为了区分正反粒子，旋量场的正反粒子的产生湮没算符，若分别表示为 $b^\pm$和 $d^\pm$，

则有下列反对易：

$$\{b(\boldsymbol{k}),b^+(\boldsymbol{k}')\}=(2\pi)^3\sqrt{\frac{E}{2m}}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$\{d(\boldsymbol{k}),d^+(\boldsymbol{k}')\}=(2\pi)^3\sqrt{\frac{E}{2m}}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$\{b(\boldsymbol{k}),b(\boldsymbol{k}')\}=\{b^+(\boldsymbol{k}),b^+(\boldsymbol{k}')\}=\{d(\boldsymbol{k}),d(\boldsymbol{k}')\}=\{d^+(\boldsymbol{k}),d^+(\boldsymbol{k}')\}=0。$$

电磁场的产生算符和湮没算符满足下列对易关系：

$$[a^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}),a^{(\lambda')+}(\boldsymbol{k}')]=2k_0(2\pi)^3\delta_{\lambda\lambda'}\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),$$

$$[a^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}),a^{(\lambda')}(\boldsymbol{k}')]=[a^{(\lambda)+}(\boldsymbol{k}),a^{(\lambda')+}(\boldsymbol{k}')]=0。$$

其中 $\lambda\lambda'$是极化矢量指标。

反粒子 antiparticle　反粒子是狄拉克电子理论首先预言的。按照量子场论，相对论性电子应该用狄拉克方程来描写，但狄拉克方程的解有两个，一个的能量本征值大于零，对应于两个自旋不同的正能态，另一个本征值小于零，对应于两个自旋不同的负能态。为了解释这一困难，狄拉克认为这两个解分别代表粒子和它的反粒子（狄拉克把它叫做空穴）。而且真空是被反粒子填满了的所谓“狄拉克海”。第一个发现正电子的是安德逊（C. D. Anderson）。费曼给正负粒子的对称性以下列描述：逆时间传播的负能粒子解等于沿时间方向传播的正能粒子解。

反常维度 anomalous dimensions　在重整化理论中，以维度正规化中引入的具有质量量纲的新参数 μ 表示的重整化单连通不可约 n 点顶角函数 $\Gamma_r^{(n)}$ 满足重整化群方程（renormalisation group equation，RG equation）

$$\left[\mu\frac{\partial}{\partial\mu}+\beta(g)\frac{\partial}{\partial g}-n\gamma(g)+m\gamma_m(g)\frac{\partial}{\partial m}\right]\cdot\Gamma^{(n)}=0。$$

如果我们从无质量粒子出发，则拉格朗日是标度不变的，但格林函数并不是标度不变的，因为参数 β 和 γ(g)不等于零。它们将贡献一个所谓反常维度。

手征反常、轴反常、三角反常 chiral anomaly，axial anomaly，triangle anomaly　在 QED 和 QCD 理论中，规范场和物质之间只有矢量形式的相互作用 $g_vJ_\mu W^\mu$，其中 $J_\mu\sim\bar{\psi}\gamma_\mu\psi$ 是费米物质场矢量流。这种形式的相互作用的轴顶角的展开式中到 e^5 阶时，包括费米场的三角形闭合回路，它不满足轴瓦德恒等式，给出的反常叫手征反常或**轴反常（axial anomaly）**、**三角反常（triangle anomaly）**。

苏宙兰特佯谬和 ABJ 反常 Sutherland paradox and ABJ anomaly　1966 年，苏宙兰特将流代数和 PCAC（部分守恒轴矢量流）假设用于中性 π^0 介子衰变过程，发现计算所得衰变概率非常之小，和实验不符。这就是苏宙兰德佯谬。以后，阿特勒、贝尔和嘉奎（Adler，Bell and Jackiw）认识到轴反常的重要性（因而有人就把它叫做 ABJ 反常），并证明当该反常抵消条件得到满足时，苏宙兰特佯谬就自然消失。

反常抵消 anomaly cancellation 规范理论中的反常是特别令人不愉快的,因为瓦德恒等式不能完全满足意味着包含有轴流和矢量流的规范理论是不可重整化的,如果只有一种费米子对三角图有贡献。然而如果有几种费米子存在,则它们的各自的贡献就有可能相互抵消,从而恢复理论的可重整性。以 Weinberg-Salam 模型为例,它含有轴矢量流,和它相联系的三角图使它失去可重整性。在中微子散射中,考虑到三角图的三条外线和 W^+, W^-, Z^0 耦合,则手征反常就自动消失。

渐近条件 asymptotic condition 在散射问题中,运动方程的解可以由格林函数(超前的 Δ_{adv} 或推迟的 Δ_{ret})来表示:

$$\phi=\phi_{in}(x)+\int dy\Delta_{ret}(x-y)\frac{\partial L_{int}}{\partial\phi(y)},$$

$$\phi=\phi_{out}+\int dy\Delta_{adv}(x-y)\frac{\partial L_{int}}{\partial\phi(y)}。$$

积分的边界条件($t=\pm\infty$时的 $\phi(x)$)有两种,一种是把它理解为算符条件,这是强渐近条件,在此条件下,将不会发生任何散射。另一种是 1955 年列曼(Lehman),赛曼桀克(Symanzik)和齐姆曼(Zimermann)提出的弱渐近条件,表示为:

$$\mathrm{Lim}\langle a|\phi(x)|b\rangle=\langle a|\phi_{out}(x)|b\rangle\ t\to+\infty;$$

$$\mathrm{Lim}\langle a|\phi(x)|b\rangle=\langle a|\phi_{in}(x)|b\rangle\ t\to-\infty。$$

其中中间态是任意态。

渐近自由 asymptotic freedom 在重整化群方程中,如果变动耦合系数 $g(t)$满足 $\beta(g)=t\frac{\partial g(t)}{\partial t}$。而且,在 $g=0$, $g=g_0$ 处分别有红外稳定的固定点和紫外稳定的固定点,并在此区间内其符号保持不变,在作标度变换 $p\to tp$, $m\to tm$, $\mu\to t\mu$ 后满足 $t\frac{\partial g}{\partial\mu}=\mu(g)$。其中 $g(t)$是变动耦合常数。它在无限大动量极限下将趋于零。这就是著名的渐近自由。这意味着在基本粒子内部夸克处于自由状态。

贝克-坎贝尔-霍斯道夫公式 Baker-Campbell-Housdorff formula BCH 公式是一个算符等式:

$$e^ABe^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\cdots$$

其中 A, B 是算符。

裸拉格朗日函数 bare Lagrangian 用重正化以后的波函数,质量和耦合常数表示的拉格朗日函数叫裸拉格朗日函数。以标量场为例:

$$L_B=\frac{1}{2}(\partial_\mu\phi_B)^2-\frac{m_B}{2}\phi_B^2-\frac{g_B}{4!}\phi_B^4$$

其中 $\phi_B=\sqrt{Z_\phi}\phi$, $Z_\phi=1+A$; $m_B=Z_m m$, $Z_m^2=\frac{m+\delta m}{1+A}$; $g_B=\mu^\varepsilon Z_g g$, $Z_g=\frac{1+B}{(1+A)^2}$。

并且认为这是“真的”拉格朗日函数,因为到微扰展开任意阶它都能给出有限的物理量。

重子数 baryon number 在通常的量子理论中,重子,例如中子,是不能衰变成为正电子和光子的,尽管该过程电荷守恒。为了解释该过程被禁戒的原因,人们引入一种守恒的量子数,以区分轻子和重子。这就是重子数。但是,在大统一理论(GUT)中,重子数并不是绝对守恒的,它预言质子是不稳定的。因此,观测质子的衰变是对大统一理论的重要检验。当前人们根据已有的实验确定质子寿命的上限大于 10^{23}年。

BRS 变换 Becchi-Rourt-Stora transformation 在非阿贝尔规范理论中,等效拉格朗日函数

$$\mathscr{L}_{eff}=-\frac{1}{4}F^\alpha_{\mu\nu}F^{\mu\nu a}+\mathscr{L}_{GF}+\mathscr{L}_{FPG}$$

在下列变换下是不变的。

$$\delta A^a_\mu=-\frac{1}{g}(D_\mu\eta^a)\lambda,\ \delta\eta^a=-\frac{1}{2}f^{abc}\eta^b\eta^c\lambda,$$

$$\delta\bar{\eta}^a=-\frac{1}{\alpha g}(\partial_\mu A^a_\mu)\lambda。$$

这就是 BRS 变换。由于这一不变性,非阿贝尔规范场也有斯拉夫诺夫-泰勒恒等式。它和 QED 理论中的瓦德恒等式类似。

博姆-阿哈伦诺夫效应 Bohm-Aharonov effect 博姆-阿哈伦诺夫效应的基本思想是:若在电子双缝衍射实验中在两个缝之间放置一个与电子运动平面相垂直的一个细长的螺线管,当螺线管通以电流后,虽然管外的磁场强度为零,但电磁势并不是零。因而由同一个源发出的电子经过不同途径到达屏幕同一点时将有一个相位差 $\Delta\delta=\frac{e}{\hbar}\oint\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{r}=\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{B}\cdot d\boldsymbol{S}=\frac{e}{\hbar}\Phi$。其中 Φ 是螺线管内的磁通量。这表

明通电螺线管的存在将引起电子衍射花样位置的平移，即使电子经过的区域并不存在电磁场。这就是博姆-阿哈伦诺夫效应，有时也叫AB效应。是1959年Y.Aharonov & D.Bohm首先提出的。1960年R.G.Chmber在实验中首先观测到这一现象。现在人们已经认识到AB效应是真空存在非平庸拓扑结构的一种表现。在规范理论中是普遍存在的一种现象。

边界算符　boundry operator　边界算符∂是一种映射，它将C_n映射为C_{n-1}：$\partial C_n \to C_{n-1}$。

勃鲁瓦度　Brouwer degree　在磁单极子问题中，对于守恒的磁流 $K^{\mu}=\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\partial_{\nu}F_{\rho\sigma}$

相应的守恒的磁荷是

$$M=\frac{1}{4\pi}\int K^0\mathrm{d}^3x$$

$$=-\frac{1}{8\pi e}\oint_{S^2}\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{abc}\hat{\phi}^a\partial_j\hat{\phi}^b\partial_k\hat{\phi}^c(\mathrm{d}^2s)_i$$

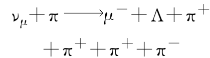
其中积分边界是无限远处的球面，是静态场位形ϕ的边界。由于$\hat{\phi}$必须是单值的，当$(ds)_i$覆盖该球面一次时，矢量ϕ将被覆盖整数d次，即磁荷$M=\frac{d}{e}$（其中d是整数）。这时的边界就描写了一个映射：$\hat{\phi}$：场空间的$S^2\to$坐标空间的S^2，d就是这一映射的勃鲁瓦度。

卡皮博角　Cabibbo angle　在夸克衰变过程中，例如$s\to u+e+\bar{\nu}_e$；$d\to u+e+\bar{\nu}_e$。奇异数可以是守恒的也可以是不守恒的，两者的作用强度不同。卡皮博角就是用来表示两种过程的不同而引入的一个参数θ_c。$G^{(1)}=G\sin\theta_c$，相应于$\Delta s=0$的过程；$G^{(2)}=G\cos\theta_c$相应于$\Delta s=1$的过程。其中G是μ介子衰变过程$\mu^+\longrightarrow\nu_\mu+e+\nu_e$的耦合强度。实验发现，卡皮博角为$0.247\pm0.008$

卡西米尔不变量　Casimir invariant　卡西米尔不变量定义为投影算符$P_\mu=\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial x^\mu}$的标积$C_1=P^\mu P_\mu$。它在洛伦兹变换下是不变的。

链　chain　在微分几何中，链这一概念是为了统一表示某种对象的不同类型的积分，以构成对偶形式而引入的概念。例如，$I_1=\int_c F_x\mathrm{d}x+F_y\mathrm{d}y+F_z\mathrm{d}z$是一个数，人们把和线相对偶的某种对象叫做“微分形式”，或简称为“形式”。和线积分对偶的是1形式。而线就是1-链。类似地点称为0-链，面积为2-链等等。C_n是n维链。

粲　charm　1975年，人们在实验上首次发现μ中微子在氢气泡室中的下列反应：



$$\nu_\mu+\pi\longrightarrow\mu^-+\Lambda+\pi^+$$
$$+\pi^++\pi^++\pi^-$$

在该反应中$\Delta S=-\Delta Q$。它不能用单独的弱相互作用来解释。因为弱相互作用有选择定则$\Delta S=\Delta Q$。粲就是用来解释上述反应而引入的一个新的量子数C。它在弱相互作用中不守恒($\Delta S=-\Delta C$)，而在强相互作用中守恒$\Delta S=\Delta C$。

手征性　chirality　手征性算符定义为$\gamma^5=\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$。狄拉克粒子的旋量波函数有多种表示形式，其中写成$\Psi=\begin{pmatrix}\psi_R(p)\\\psi_L(p)\end{pmatrix}$的是在手征表象中的形式。对于$m=0$的狄拉克粒子，狄拉克方程可以分解为两个独立的方程，在动量表象中可写成$(p_0+\sigma\cdot\boldsymbol{p})\psi_L(p)=0$和$(p_0-\sigma\cdot\boldsymbol{p})\psi_R(p)=0$。叫做威尔(Weyl)方程。$\psi_L(p)$和$\psi_R(p)$也叫威尔旋量波函数。

经典数和量子数　c-number and q-number　在量子场的路径积分量子化理论中，广义坐标和广义动量不是算符而是经典数，这就是所谓c数。而把作为算符的广义坐标和广义动量叫做q数。然而，必须指出，这里的c数并不是一般的数。当要用生成泛函方法来描写费米子时，它必须遵从反对易关系，它就是反对易c数。它遵从格罗斯曼代数。是1855年Herman Grassmann在一篇关于线性代数的论文中首先提出的。（见格罗斯曼代数词条）。

反对易子和反对易关系　anti-commutator and anti-commutation relation　在量子场理论中，为了避免费米子系统能量的不正定性，人们对费米子算符定义了一种不同于经典理论中泊松括号形式的运算规则：$\{\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\}=\boldsymbol{AB}+$

BA。$\{A,B\}$就叫算符 A,B 的对易子。这就是反对易关系。

色 colour 色是一种量子数,它表示的对称性不同于空间、自旋等。是基本粒子的夸克模型所要求的。根据这一模型,重子态是由三个夸克构成的色单态,介子是由夸克和反夸克构成的色单态。

连通图 connected diagram 按照费曼规则,所有的微观过程都可以用相应的费曼图来形象地表示。在二阶以上的费曼图中,有两种性质不同的图。一种是连通图,一种是不连通图。后者表示粒子的独立运动,对反应没有贡献。前者每一条线都和其他线相连,对过程的 S 矩阵元有贡献。和连通图相应的生成泛函 $W[J]$和原始的生成泛函 $Z[J]$有下列关系。

$$W[J]=-\mathrm{i}\ln Z[J]$$

例如 ϕ^4 理论的两点函数 $\frac{\delta^2 W}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}\big|_{J=0}=-i\cdot\frac{\delta^2 Z}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)}=i\tau(x_1,x_2)$。所以,泛函 $W[J]$ 生成的是连通图传播子,而不包含任何不连通部分。

生成泛函 generating functional 在路径积分量子化理论中,若定义在有源 J 作用时的真空→真空的跃迁振幅正比于

$$Z[J]=\int D\phi\exp\{\mathrm{i}\int \mathrm{d}^4x[L(\phi)+J(x)\phi(x)+\frac{\mathrm{i}}{2}\varepsilon\phi^2]\}\propto\langle 0,\infty|0,-\infty\rangle^J。$$

则当 L 取为自由粒子拉格朗日函数密度时,有

$$Z_0[J]=\exp[-\frac{\mathrm{i}}{2}\int J(x)\Delta_F(x-y)J(y)\cdot \mathrm{d}x\mathrm{d}y]\times\int D\phi\exp[-\frac{\mathrm{i}}{2}\int\phi(\nabla+m^2-i\varepsilon)\phi\mathrm{d}x]。$$

其中 $J(x)$是相应于 ϕ 的源项。第二项实际上是一个数,可以吸收到归一化常数中去,它对实际的反应没有影响。可写成

$$Z_0[J]=N\exp[-\frac{\mathrm{i}}{2}\int J(x)\Delta_F(x-y)J(y)\cdot \mathrm{d}x\mathrm{d}y]。$$

在此表示下,通过它对源的泛函导数可以产生 n 点格林函数:

$$\langle 0|T(\phi(x_1)\phi(x_2)\ldots\phi(x_n))|0\rangle=\frac{1}{i^n}\frac{\delta^n Z_0[J]}{\delta J(x_1)\delta J(x_2)\ldots\delta J(x_n)}\Big|_{J=0}。$$

所以 $Z_0[J]$就是场 $\phi(x)$的生成泛函。

联络系数 connected coefficient 和广义相对论类似,逆变矢量的规范协变导数可以写成:

$$D_\nu V^\mu=\partial_\nu V^\mu+\Gamma^\mu_{\lambda\nu}V^\lambda。$$

其中 $\Gamma^\mu_{\lambda\nu}$叫做联络系数。它起着矢量势 A^a_μ 的作用,因为它把一点的矢量的分量和邻近一点的矢量的分量联系起来,当这两个相邻的两个矢量是通过“平行”移动相联系的。有人也把 A^a_μ 叫做联络。

协变矢量和逆变矢量 covariant vector and contravariant vector 它们都是四维矢量,但在坐标变换下的变换性质不同。协变矢量的脚标在右上方,逆变矢量的脚标在右下方。两者通过度规张量相联系:$x_\mu=g_{\mu\nu}x^\nu$。反之,$x^\nu=g^{\nu\mu}x_\mu$。

库仑散射 Coulomb scattering 带电粒子在库仑场中的散射叫库仑散射。按 QED 理论计算得到的散射截面和经典库仑散射截面一样,遵从卢瑟福散射公式

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4}\left(\frac{ZZ'e^2}{2E}\right)^2\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)}。$$

库仑势的修正 modification for Coulomb potential 在量子场理论中,考虑到真空极化,两个带电都是 e,相距 r 的电荷的光子传播子修正为:

$$\mathrm{D}_{\mu\nu}=-\frac{g_{\mu\nu}}{k^2}\left(1-\frac{e^2}{4\pi r}+\frac{e^2}{60\pi^2}\frac{k^2}{m^2}\right)。$$

相应的势为 $\frac{e^2}{4\pi r}+\frac{e^2}{60\pi^2}\frac{\delta^3(r)}{m^2}$。其中第二项就是修正项,也叫戊林项(Uehling term)。根据这一修正,QED 预言氢原子的 $2S_{1/2}$和 $2P_{1/2}$能级将分立,前者为 1057.9MHz 高于后者。其中 −27.1MHz 就来自真空极化。这一结果和实验相比差别小于 0.1MHz。这表明 QED 理论有较大的精确度。这就是兰姆移动(Lamb shift)。

相对项 counter term 在重正化理论中,有一种看法认为,在原始的拉格朗日函数中的参数,如 m,g 等是物理的质量和耦合常数。另

一方面，由于它不能给出有限的格林函数，故要求在原始拉格朗日函数上增加一个附加项，以消除发散性。这就是相对项。

规范协变导数 gauge covariant derivative 量子场论中的协变导数是对某个规范群来说的。对于确定的规范群，规范协变导数定义为

$$D_\mu = \partial_\mu + \frac{i}{2} g\tau_a A_\mu^a$$

简称为协变导数。其中 τ^a 是规范群的生成元，g 是耦合常数。

达朗贝尔算符 d'Alembertian operator 达朗贝尔算符定义为

$\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$。其中 ∇^2 是拉普拉斯算符。在直角坐标中表示为 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$。

导数耦合 derivation coupling 实验上发现 π-N 散射是一种赝标相互作用，因为 π 介子是一种赝标粒子。为描写这种相互作用，人们引入包括介子场的导数在内的一种相互作用形式：$\mathscr{L}_{int} = \frac{f}{m}\bar{\psi}\gamma_5\gamma^\mu\tau\psi\partial\phi$。其中 f 是耦合常数，m 是介子质量，$\bar{\psi}\psi$ 是核子波函数，τ 是同位旋矢量。实验测得，$\frac{f}{4\pi}=0.08$

微分形式 differential form 为了统一地表示各种积分形式，引入术语"微分形式"或简称为"形式"。若把线和面都叫做链，例如 0-链就是点，1-链就是线，2-链是面，3-链是体积，如此等等，则对某种链的积分就叫做该链的微分形式。例如 0-形式是函数，1-形式是 $A\mathrm{d}x + B\mathrm{d}y + C\mathrm{d}z$，2-形式是 $f\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y + g\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z + h\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}a$ 所以，形式是链的对偶。

维度分析 dimensional analysis 在用维度正规化理论研究发散问题时，维度分析是很有用的工具。在 d 维空间，由于作用量是无量纲的，所以拉格朗日函数密度的量纲是长度的负 d 次方写成$[\mathscr{L}] = L^{-d}$，或者$[\mathscr{L}] = \Lambda^d$，$\Lambda$ 是动量。类似地，$[\phi] = L^{1-d/2}$或者 $= \Lambda^{(d/2)-1}$。任意一种相互作用 $g\phi^r$，如果把耦合常数的量纲写成$[g] = L^{-\delta}$，则 $\delta = d + r - rd/2$。相应的表观发散度 $D = d-(-1+d/2)E - n\delta$。其中 E 是费曼图的外线数，n 是顶角数。这就是说，通过维度分析人们可以立即知道不同理论的表观发散度。

狄拉克方程 Dirac equation 用以描写自旋为 1/2 及其整数倍的相对论性粒子的波动方程叫狄拉克方程。它源于旋量波函数在洛伦兹群变换下的不变性要求。维格纳(Wigner)早就认识到，粒子物理的基本群不是均匀的洛伦兹群，而是非均匀的洛伦兹群，即邦卡莱群(Poincare'group)。该群由洛伦兹推动(boost)和转动(rotation)变换以及时空平移(translation in space-time)组成。以 ψ 表示的四分量旋量波函数在坐标空间的狄拉克方程为$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi=0$。或者其伴随自旋波函数 $\bar{\psi}=\psi^+\gamma^0$ 满足 $\bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)=0$。其中 γ^μ 是狄拉克矩阵，m 是粒子质量。在动量表象，方程为：$(\gamma^\mu p_\mu - m)\psi(p)=0$。

双线型狄拉克量 bilinear Dirac quantities 由狄拉克旋量波函数和狄拉克矩阵可以构成有用的双线性形式：标量 $\bar{\psi}\psi$，赝标量 $\bar{\psi}\gamma_5\psi$，矢量 $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$ 赝矢量 $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\psi$，二阶张量 $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^\nu\psi$，二阶赝张量 $\bar{\psi}\gamma^\mu\gamma^5\gamma^\nu\psi$。高阶张量可以类似地构成。

正能态和负能态 positive and negative energy states 克莱因方程的能量方程是 $E = \pm(m^2c^4 + p^2c^2)^{\frac{1}{2}}$。它显然包含一个负能解。与之相应的粒子态就是粒子的负能态。类似地，狄拉克方程也有相应的负能态，每个负能态有两个自旋不同的状态。实际上，这就是反粒子态。

非相对论极限 non-relativistic limit 狄拉克方程在标准表象中的二分量形式 $\psi=\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}$ 的两个分量所满足的狄拉克方程给出它们之间的联系：

$$v = \frac{\sigma\cdot(p - eA)}{E + m - e\phi}u$$

在相对论极限 $E\approx m$，$p\approx mv$ 下，故有

$$v\approx\frac{1}{2m}\sigma\cdot(p - eA)u = 0\left(\frac{v}{c}\right)u$$

这就是狄拉克方程的非相对论极限。

狄拉克场 Dirac field 满足狄拉克方程的场叫狄拉克场，它描写自旋为普朗克常数 $\hbar$ 的半整数倍的粒子。如电子，中子等。

狄拉克矩阵 Dirac matrices 为了能用旋量波函数 ψ 构成在洛伦兹变换下有一定变换特性的量，以便构造必须是标量的拉格朗日函数，以及能描述自旋是半整数的费米子，人们引入狄拉克矩阵，定义如下：$\gamma^0=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，$\gamma^i=\begin{pmatrix}0&-\sigma^i\\\sigma^i&0\end{pmatrix}$。满足下列反对易关系：$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2g^{\mu\nu}$。$g^{\mu\nu}$是度规张量。其中 σ^i 是泡利矩阵：$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$，$\sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$，$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$。另外为了构成赝标量、赝矢量、赝张量等，还定义一个 γ^5 矩阵：

$$\gamma^5=i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$$

手征表象 chiral representation 在不同的表象中，旋量波函数可以有不同的表示形式。人们把旋量波函数在其中写成下列形式的表象叫手征表象。$\psi(p)=\begin{pmatrix}\phi_R(p)\\\phi_L(p)\end{pmatrix}$。

标准表象 standard representation 称 γ^μ 矩阵在其中取对角形式的表象为标准表象。在标准表象中，γ^0 是对角的：

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}$$

若把狄拉克场的正能解和负能解分别写成：

$\psi(x)=u(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$（正能）和

$\psi(x)=v(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$（负能）

则狄拉克方程取下列形式：

$$(\gamma\cdot p-m)u(p)=0,$$
$$(\gamma\cdot p+m)v(p)=0,$$
$$\bar{u}(p)(\gamma\cdot p-m)=0,$$
$$\bar{v}(p)(\gamma\cdot p+m)=0。$$

$\bar{u}(p)=u^+\gamma^0$ 和 $\bar{v}(p)=v^+\gamma^0$ 是它们的伴随表示。u^+和 v^+是 u 和 v 的厄米共轭。

带撇符号 slash notation 为方便起见，在量子场理论中普遍使用所谓带撇符号，定义如下：

$$\not{a}\equiv a_\mu\gamma^\mu=a\cdot\gamma$$

***d* 维空间 *d* dimensions** 在维度正规化理论中，人们是在 d 维空间中定义某个积分，然后解析延拓到四维空间。规定 d 维闵可夫斯基空间度规张量的特征是（+，−，−，…）。在此空间，狄拉克矩阵也要满足下列反对易关系：$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2g^{\mu\nu}$，所以有 $\gamma^\mu\cdot\gamma^\mu=\delta^\mu_\mu=d$。$\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma_\mu=(2d)\gamma^\nu$。以及 T_r（奇数个 γ）$=0$。$T_r(\mathrm{I})=f(d)$ $T_r(\gamma^\mu\gamma^\nu)=f(d)g^{\mu\nu}$，$T_r(\gamma_\mu\gamma_k\gamma_\lambda\gamma_\nu)=f(d)(g_{\mu k}g_{\nu\lambda}-g_{\mu\nu}g_{k\lambda}+g_{\mu\lambda}g_{k\nu})$。

但在 d 维空间。列维–西维塔符号没有定义，故不能定义 γ_5 矩阵。这导致所谓手征反常问题。（见手征反常条）

狄拉克磁单极子 Dirac monopole 狄拉克磁单极子是一种假设的点状磁荷，可以在麦克斯韦方程中引入，使得电场和磁场变得对称。狄拉克证明，用量子理论描写带有磁单极子的电磁现象时，将导致电荷和磁荷必须满足量子化条件。这种磁单极子常叫做狄拉克磁单极子，以区别于托霍夫–波利亚科夫磁单极子。实际上，当存在这种磁单极子、而且相应的磁场是库仑型的时候，则放置在坐标原点的磁荷 g 产生的磁场由下列方程给出（这里我们用的是高斯单位制）：

$$\boldsymbol{B}=\frac{g}{r^3}\boldsymbol{r}=g\nabla(\frac{1}{r})$$

而且有 $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=4\pi\delta^3 r$。和电荷一样，通过围绕原点的球面的磁通量为 $\Phi=4\pi r^2B=4\pi g$。磁荷的存在使空间出现了奇点，而描写它的波函数单值性要求将给出下列量子化条件：

$$\mathrm{e}g=\frac{1}{2}nhc。$$

其中 n 是自然数，h 是普朗克常数，c 是光速。

狄拉克海 Dirac sea 把狄拉克方程用于静止粒子 $\boldsymbol{P}=0$ 将给出两个方程：

$$\gamma^0P_0\psi=m\psi,$$
$$P_0\psi=m\gamma^0\psi。$$

它们分别给出两个正能解和两个负能解。这是因为 γ^0 矩阵的本征值分别有两个+1 和两个−1。$E=+(m^2+p^2)^{1/2}$和 $E=-(m^2+p^2)^{1/2}$。对此，狄拉克建议负能态已经完全被占满，泡利不相容原理将阻止更多的电子进入负能态的“海”。这就是所谓狄拉克海。

不连通图 disconnected graph 在高阶费曼

图中，代表粒子独立运动，而无相互联系的图叫做不联通图。这时的相互作用只修正它们的传播子。

发散性 divergences 存在圈图的费曼图都是发散的。以 QED 为例，无论是电子自能图，真空极化，还是高阶顶角，相应的 S 矩阵元都是发散的。这是因为按照定域量子场论，自由度是无限的。和圈图相应的 S 矩阵元中都有发散的积分。

对偶变换 duality transformation 也叫洪祁“*”算符（Hondge* operator）。在微分几何中人们经常用“链—chain”和“形式—form”等术语来表示某些运算。对偶变换就是其中之一。它定义了一个变换，将 p-形式转变为维度相同的$(n-p)$-形式：

$$^{*}(\mathrm{d}x^{i_1}\wedge\mathrm{d}x^{i_1}\wedge\ldots\wedge\mathrm{d}x^{i_1})=\frac{1}{(n-p)!}\varepsilon_{i_1}\varepsilon_{i_2}\cdots\varepsilon_{i_p}\varepsilon_{i_{p+1}}\varepsilon_{i_n}\mathrm{d}x^{ip+1}\wedge\mathrm{d}x^{ip+2}\wedge\ldots\wedge\mathrm{d}x^{i_n}。$$

其中 ∧ 是一种运算符号（见微分形式条）。

对偶张量 dual tensor 相应于电磁张量 $F^{\mu\nu}=\partial^{\mu}A^{\nu}-\partial^{\nu}A^{\mu}$，可以定义一个对偶张量 $\widetilde{F}^{\mu\nu}=\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\rho\sigma}$，使得麦克斯韦方程变得非常紧凑：$\partial_{\mu}F^{\mu\nu}=0$ 和$\partial_{\mu}\widetilde{F}^{\mu\nu}=0$。

圈图展开 loop expansion 按照路径积分量子化理论，若把生成泛函中的拉格朗日函数密度分成自由部分和相互作用部分：$\mathscr{L}=\mathscr{L}_0+\mathscr{L}_{\mathrm{I}}$，则生成泛函可以写成下列形式：

$$Z[J(x)]=\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\mathscr{L}_{\mathrm{int}}\left[\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial J}\right]\right\}Z_0[J],$$

其中 $Z_0[J]$是自由粒子的生成泛函，

$$Z_0[J]=\int D\phi\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int[\mathscr{L}_0+\hbar J\phi]\right\}$$

于是，有相互作用的生成泛函可以表示成为含有不同顶角及传播子的图的叠加。相应的高阶图含有不同的圈图。每个顶角贡献一个 $\hbar^{-1}$因子，每个传播子贡献一个 $\hbar$ 因子。所以在一般的 n 阶微扰展开中，每个这样的图贡献的因子是 $\hbar^{L-1}$。其中 L 是 n 阶费曼图包含的圈图的个数，这就是圈图展开。

弱电相互作用 electroweak interaction 1960 年格拉萧（Glashow）、温伯格（Weinberg）和萨拉姆（Salam）第一次成功地用一个非平庸的定域规范理论将电磁相互作用和弱相互作用统一了起来。在这个理论中，统一的相互作用就叫做弱电相互作用。实际上，电磁相互作用仍是由光子传递的，而弱相互作用则是由中间玻色子 $W^{\pm}$和 Z^0 传递的。这三个中间玻色子的质量大约是质子质量的 80 倍，而且还应有相应的中性流存在。这些预言都得到实验的证实，成为规范理论的一大成就。

能量-动量张量 energy-momentum tensor 场 ϕ 的能量-动量张量定义为：

$$T^{\mu}_{\nu}=\frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\phi)}\partial_{\nu}\phi-\delta^{\mu}_{\nu}L$$

根据诺宙定理，它是和时空平移不变性相应的守恒量。

等时对易关系 equal-time commutation relation 标量场 ϕ 和相应的动量的等时对易关系是

$$[\phi(x,t),\pi(x',t)]=\mathrm{i}\delta(x-x'),$$
$$[\phi(x,t),\phi(x',t)]=0,$$
$$[\pi(x,t),\pi(x',t)]=0。$$

欧几里得群 Euclidean group 转动群 $SU(2)$的李代数包括平面中的平动生成元 L_1L_2 和转动生成元 J_3，它们构成欧几里得 $E(2)$群。

欧几里得时空 Euclidean space-time 时轴为虚数的时空叫欧几里得时空。它的不变区间为：

$$\mathrm{d}s^2=(\mathrm{d}x^0)^2-(\mathrm{d}x^1)^2-(\mathrm{d}x^2)^2-(\mathrm{d}x^3)^2$$
$$=-\sum_{\mu=0}^{4}(\mathrm{d}x^{\mu})^2$$

其中 $x^4=\mathrm{i}ct=\mathrm{i}cx^0$ 是虚时轴，c 是真空中的光速。

欧拉-拉格朗日方程 Euler-Lagrange equations 动力学变量 ϕ 的欧拉-拉格朗日方程为：

$$\frac{\partial L}{\partial\phi}-\frac{\partial}{\partial x^{\mu}}\left[\frac{\partial L}{\partial(\partial_{\mu}\phi)}\right]=0。$$

其中 L 是拉格朗日函数，是场量 ϕ 和它对时空的导数$\partial_{\mu}\phi$ 的函数。

欧拉-马修罗尼常数 Euler-Mascheroni constant 欧拉-马修罗尼常数定义为：

$$\gamma=-\psi_1(n+1)=0.577。$$

其中 $\psi_1(n+1)=1+\frac{1}{2}+\cdots+\frac{1}{n}$

外微商算符 exterior derivative operator 外微商算符 d 定义为：

$$\mathrm{d}(A\mathrm{d}x+B\mathrm{d}y+C\mathrm{d}z)=\frac{\partial A}{\partial y}\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}x+\frac{\partial A}{\partial z}\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}x+\frac{\partial B}{\partial x}\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y+\frac{\partial B}{\partial z}\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}y+\frac{\partial C}{\partial y}\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z+\frac{\partial C}{\partial x}\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}z=\left(\frac{\partial B}{\partial x}-\frac{\partial A}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y+\left(\frac{\partial C}{\partial y}-\frac{\partial B}{\partial z}\right)\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z+\left(\frac{\partial A}{\partial z}-\frac{\partial C}{\partial x}\right)\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}x$$

伴随外微商算符 adjoint exterior derivative operator 伴随外微商算符 δ 定义为：$\delta=(-1)^{np+n+1}{}^*d^*$。以下式为例，δ 把 1-形式 $\boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{s}$ 变为 0-形式：

$$\begin{aligned}\delta(\boldsymbol{v}\mathrm{d}\boldsymbol{s})&=\delta(v_x\mathrm{d}x+v_y\mathrm{d}y+v_z\mathrm{d}z)\\&=-{}^*\mathrm{d}^*(v_x\mathrm{d}x+v_y\mathrm{d}y+v_z\mathrm{d}z)\\&=-{}^*\mathrm{d}(v_x\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z+v_y\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}xx+v_z\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y)\\&=-{}^*\left(\frac{\partial v_x}{\partial x}+\frac{\partial v_y}{\partial y}+\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z。\\&=\mathrm{div}\,\boldsymbol{v}。\end{aligned}$$

其中 * 是 Hodge 算符或对偶算符。

法狄也夫–波波夫鬼场 Faddeev-Popov ghost field 在规范场的路径积分量子化理论中，生成泛函的等效拉格朗日函数中，法狄也夫–波波夫鬼场是为补偿规范固定项而引入的。定义为：

$$\mathscr{L}=\bar{\eta}^a\mathrm{M}_{ab}\eta^b。$$

其中 η 是遵从格罗斯曼代数的标量场（见格罗斯曼代数条），即鬼场。

法狄也夫–波波夫技术 Faddeev-Popov technique 这是一种成功处理非阿贝尔规范场的规范自由度问题的理论。它引入格罗斯曼标量场来把补偿规范固定项的量变成等效拉格朗日函数，从而得到相关的生成泛函，并实现量子化。这就是法狄也夫–波波夫技术。

费米黄金律 Fermi golden rule 在计算散射截面时，经常用到跃迁概率 W，定义为：

$$W=(2\pi)^8\int\mathrm{d}\tilde{k}_1\mathrm{d}\tilde{k}_2\mathrm{d}\tilde{q}_1\mathrm{d}\tilde{q}_2f(k_1)\cdot g(k_2)f^*(q_2)g^*(q_2)\times\delta(p'_1+p'_2-k_1-k_2)\delta((p'_1+p'_2-q_1-q_2)\times M(p'_1,p'_2,k_1,k_2)M(p'_1,p'_2,q_1,q_2))。$$

其中 M 是洛仑兹不变的振幅，定义为：

$$\langle p'_1,p'_2,...,|S-1|p_1,p_2,...\rangle=(2\pi)^4\delta^4(P_f-P_i)_\iota M(p'_1,p'_2...,p_1,p_2,...)。$$

$$\tilde{f}(x)=\int\mathrm{d}\tilde{q}\mathrm{e}^{iqx}f(x),$$

$$\mathrm{d}\tilde{f}=\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^32q_0};$$

以及 $\tilde{g}(x)=\int\mathrm{d}\tilde{q}\mathrm{e}^{iqx}g(x)$,

$$\mathrm{d}\tilde{g}=\frac{\mathrm{d}^3q}{(2\pi)^32q_0}$$

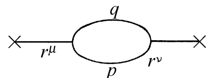
注意到积分号下的 δ 函数，可以表示成为：

$$W=\int\mathrm{d}^4x|\tilde{f}(x)|^2|g(x)|^2(2\pi)^4\delta\cdot(p'_1+p'_2-p_1-p_2)|M(p'_1,p'_2,p_1,p_2)|^2。$$

其中，第二个因子就是费密黄金律的表示式。

费米弱作用理论 Fermi weak interaction theory 费米弱相互作用理论是关于弱相互作用的早期理论，把弱相互作用看做是一种参与作用的四个粒子（如中子的 β 衰变中的中子、质子、电子和中微子）之间的点相互作用。这是因为这种作用的力程是如此之短，似乎不需要任何场来传递它。

费米圈图 Fermi loop 费米子圈图是由费米子内线组成的闭合回路。例如作为标量粒子传播子修正，费米子圈图就是有电子和正电子内线构成的闭合回路。按照费曼规则，该圈图对 S 矩阵的贡献是 $\gamma^\mu S_F(p)\gamma^\nu S_F(q)$。



费曼公式 Feynman formula 费曼公式是处理费曼积分时的一种有用的变换公式，它将两个分式的乘积变为一个积分：

$$\frac{1}{ab}=\int_0^1\frac{\mathrm{d}z}{[az+b(1-z)]^2}。$$

以及将两个分数之和变成一个分数的积分：

$$\frac{1}{A^n}-\frac{1}{B^n}=\int_0^1\frac{n(B-A)\mathrm{d}z}{\{Az+B(z-1)\}^{n+1}}$$

费曼规范 Feynman gauge 在规范场理论中，如果在规范场拉格朗日函数中加上下列形式的规范固定项：

$$\mathscr{L}_{GF}=-\frac{1}{2\xi}(\partial_{\mu}A^{\mu}+\xi M\phi)^2,$$

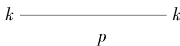
则参数 ξ 决定所取规范的具体形式。例如，$\xi=1$ 是费曼规范，$\xi=0$ 是兰道规范。$\xi\to\infty$ 使相应的传播子是不可重正的，而有限的 ξ 则是可重正的。后者叫做 R 规范即可重整化规范。

费曼传播子 Feynman propagator 费曼图中的内线相应于不同场的传播子。包括标量场传播子、旋量场传播子、电磁场传播子及规范场传播子等。

在洛仑兹规范下，标量场的传播子是：

$$\Delta_F(k)=\frac{1}{(2\pi)^4}\frac{i}{p^2-m^2+i\varepsilon}\cdot k$$

在费曼图中，一般以虚线表示：



旋量场的传播子是：

$$S_F(p)=\frac{1}{i\gamma^{\mu}p_{\mu}-m}$$

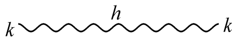
在费曼图中一般以实线表示：

$$k \text{ ———— } k$$
$$p$$

电磁场的费曼传播子定义为：

$$D_F(k)_{\mu\nu}=-\frac{g_{\mu\nu}}{k^2}。$$

其中是度规张量在费曼图中一般以波纹线表示：

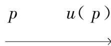


一般形式的电磁场传播子可以写成

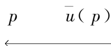
$$D_F(k)_{\mu\nu}=-\frac{1}{k^2}\left[g_{\mu\nu}-(\alpha-1)\frac{k_{\mu}k_{\nu}}{k^2}\right]。$$

$\alpha\to1$ 相应于费曼规范；$\alpha\to0$ 相应于兰道规范。

标量场和旋量场的费曼规则 Feynman rules for scalar and spinor fields 入态费米子外线

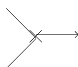


出态费米子外线



顶角

$$ig(\gamma_5)(2\pi)^2\delta^4(p-k-p')$$



费米子传播子内线 $\overrightarrow{\quad p\quad}$ $\frac{i}{(2\pi)_4}\frac{1}{\gamma\cdot p-M}\Big($带有对的四维积分 $\int d^4p\Big)$

标量粒子传播子内线 $\overset{\Longrightarrow}{p}$ $\frac{i}{(2\pi)_4}\frac{1}{p^2-M^2}\Big($带有对的四维积分 $\int d^4p\Big)$

轴规范的费曼规则 Feynman rules in axial gauge 轴规范由下列条件定义：

$t^{\mu}A_{\mu}^{\alpha}=0$，$t^{\mu}t_{\mu}=-1$。其中 t^{μ} 是类空矢量，A_{μ}^{α} 是规范场，a 是规范群指标。相应的规范固定条件是 $F^a=t^{\mu}A_{\mu}^{\alpha}$。在规范变换下，规范场按下列规律变换：

$\delta F^a=f^{abc}\omega^b t^{\mu}A_{\mu}^{c}+t^{\mu}\partial_{\mu}\omega^a=t^{\mu}\partial_{\mu}\omega^a$。因此有 $\frac{\partial F^a}{\partial\omega^b}=\delta^{abc}t^{\mu}\partial_{\mu}$。相应的等效拉格朗日函数密度就是：

$$\mathscr{L}+\mathscr{L}_{GF}=\frac{1}{4}G_{\mu\nu}^{a}G^{a\mu\nu}-\frac{1}{2\alpha}(t^{\mu}A_{\mu}^{a})^2。$$

经过分部积分就可以得到作用量的四次部分：

$$\frac{1}{2}\int A^{\mu a}\left(\Box g_{\mu\nu}-\partial_{\mu}\partial_{\nu}-\frac{1}{\alpha}(t_{\mu}t_{\nu})^2A^{\mu\nu}dx\right)。$$

在动量空间，积分号下的括号中的算符就是：

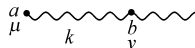
$$-k^2g_{\mu\nu}+k_{\mu}k_{\nu}-\frac{1}{\alpha}t_{\mu}t_{\nu}。$$

其逆是：

$$-\frac{1}{k^2}\left[g^{\mu\nu}+\frac{(t^2+\alpha k^2)k^{\mu}k^{\nu}}{(k\cdot t)^2}-\frac{k^{\mu}t^{\nu}+t^{\mu}k^{\nu}}{(k\cdot t)}\right]。$$

当 $\alpha\to0$ 时，有下列传播子：

$$-\frac{i}{k^2}\left[g^{\mu\nu}+\frac{t^2k^{\mu}k^{\nu}}{(k\cdot t)^2}-\frac{k^{\mu}t^{\nu}+t^{\mu}k^{\nu}}{(k\cdot t)}\right]\delta^{ab}$$



洛伦兹规范的费曼规则 Feynman rules in Lorentz gauge 在洛伦兹规范下，QED 的洛伦兹条件不包含规范对称性指标，可以直接写成 $F=\partial^{\mu}A_{\mu}$，另一方面，规范场满足下列变换关系：$\delta A_{\mu}=\partial_{\mu}\omega$。即 $\Phi\delta F=\Box\omega$，从而有 $M=\frac{\delta F}{\delta\omega}=\Box$，相应的生成泛函为：

$$Z=N\int DA_{\mu}\exp\left\{i\int\left[L_0-\frac{1}{2}(\partial\cdot A)^2\right]dx\right\}\cdot$$

$$\int D\eta D\bar{\eta}\exp\left\{ i\int\bar{\eta}\Delta\eta d x\right\}。$$

相应的两点函数是：

$$-\frac{i}{k}\left[g_{\mu\nu}+(\alpha-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2}\right]$$

非阿贝尔规范理论的费曼规则 Feynman rules in non-Abelian gauge theories 对于非阿贝尔规范场，相应的费曼规则是：

a b $(i\Box)^{-1}=\frac{i}{k^2}\delta^{ab}$

b c a b $-gf^{abc}P_\mu$

a,μ k b ν

$$-\frac{i}{k^2}\left[g_{\mu\nu}+(\alpha-1)\frac{k_\mu k_\nu}{k^2}\right]\delta^{ab}$$

非相对论量子力学的费曼规则 Feynman rules for non-relativistic quantum mechanics 非相对论量子力学的费曼规则如下：

$\boldsymbol{p}, E$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^4}\frac{i\hbar}{E-\frac{p^2}{2m}+i\varepsilon}$$

v q,W

$$\frac{-i}{\hbar}(2\pi\hbar)^4\nu(q, W)$$

场的正则量子化 field canonial quantization 以标量场为例，场的正则量子化程序如下：

①把场系统看做是量子系统，场量就是厄米算符，其傅里叶展开是：

$$\phi(x)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^{3/2}2\omega_k}[a(k)e^{-ikx}+a^+(k)e^{-ikx}]。$$

其中 $\omega_k=(\boldsymbol{k}^2+m^2)^{1/2}$。$a(k)$和$a^+(k)$分别是标量粒子的湮没算符和产生算符。积分的测度是相对论不变的。

②算符及其相应的动量$\pi(\boldsymbol{x},t)\equiv\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\phi}}$满足海森堡对易关系：

$$[\phi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{x}',t)]=i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'),[\phi(\boldsymbol{x},t),\phi(\boldsymbol{x}',t)]=[\pi(\boldsymbol{x},t),\pi(\boldsymbol{x}',t)]=0$$

③由算符组成的力学量满足正则方程：

$$\dot{O}=i[O,H]。$$

其中 H 是系统的哈密顿量。

味荷 flavour 味荷是一种量子数，用来区分不同夸克的性质，以满足泡利不相容原理。在基本粒子的夸克理论中，所有的重子都是由不同性质的夸克组成。目前已知的最低能态的夸克有 5 种，分别是上夸克(up quark)、下夸克(down quark)、奇异夸克(strange quark)、顶夸克(top quark)和底夸克(button quark)。人们把上、下、奇异、顶和底叫做不同的味，用味荷形象化地表示夸克的不同性质。

形状因子 form factor 在 QCD 理论中，电子在质子上的散射截面可以写成点状物体的散射截面和两个因子的乘积：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{poit}\left(\frac{G_E^2+\frac{q^2}{4M^2}G_M}{1+\frac{q^2}{4M^2}}+\frac{q^2}{4M^2}\cdot 2G_M^2\tan^2\frac{\theta}{2}\right)。$$

其中形状因子 $G_E(q^2)$和 $G_M(q^2)$分别是电和磁的形状因子。有下列形式：

$$G(q^2)=\left(\frac{1}{1+\frac{q^2}{M^2}}\right)^2。$$

四点函数 four-point function 在路径积分量子化理论中，四点函数定义为：

$$\tau(x_1,x_2,x_3,x_4)=\frac{\delta^4 Z[J]}{\delta J(x_1)(x_2)\delta J(x_3)\delta J(x_4)}\bigg|_{J=0}$$

电磁场的四维矢量势 four-vector potential for electro-magnetic field 电磁理论的相对论协变形式常用静电势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$ 来表示，它们构成四维矢量势 $A^{\mu}=(\phi,\boldsymbol{A})$

泛函微商 functional differentiation 泛函微商定义为：

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(x)}=\lim\frac{F[f(x)+\varepsilon\delta(x-y)]-F[f(x)]}{\varepsilon}$$

泛函积分 functional integral 按照路径积分量子化理论，从时间 t_i 到 t_f 的传播子是：

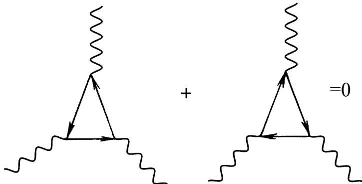
$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\int\cdots\int \mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_n\langle q_f,t_f|q_n,t_n\rangle\langle q_nt_n|q_{n-1},t_{n-1}\rangle\cdots\langle q_{i+1}t_{i+1}|q_i,t_i\rangle。$$

积分对所有可能的“轨道”进行。在连续极限下，它可以写成：

$$\langle q_f,t_f|q_i,t_i\rangle=\int\frac{DqDp}{h}\exp\frac{i}{h}\cdot\left\{\int\mathrm{d}\tau[p\dot{q}-H(p,q)]\right\}。$$

其中 $q_i=q(t_i)$，$p_i=p(t_i)$。这就是泛函积分。

夫雷定理 Furry theorem 按照费曼规则，三光子顶角图的电子外线数等于零，外光子线数为3，故相应的表观发散度 $D=1$，应是线性发散的。但由于存在相应的另一种费曼图，其中电子线的箭头方向相反，则两者相抵消。这就是夫雷定理。



纯规范 pure gauge 在规范场理论中，满足边界条件的规范场 $\boldsymbol{A}=\frac{1}{e}\nabla(n\theta)$，当 $r\to\infty$ 即 $A_r\to 0$，$A_\theta\to\frac{n}{er}$，这就叫纯规范。在纯规范下，规范场可以写成 $A_\mu\to\partial_\mu\chi(r\to\infty)$。

托霍夫规范 'tHooft guage 在规范场理论中，如果规范固定项写成：$\mathscr{L}_{\mathrm{GF}}=-\frac{1}{2\xi}(\partial_\mu A^\mu+\xi M\phi_2)^2$，则参数 ξ 决定具体的规范。这样的一类规范就叫做托霍夫规范。

U 规范 U gauge 即幺正规范，它不仅是可重正的，而且是一种物理规范。在规范场理论中，如果规范固定项写成：$\mathscr{L}_{\mathrm{GF}}=-\frac{1}{2\xi}(\partial_\mu A^\mu+\xi M\phi_2)^2$，当规范参数 $\xi\to\infty$ 时就是幺正规范。这时，只有四个场对幺正条件有贡献。

规范场的几何解释 geometry of gauge fields 和引力场理论类似，规范势 A_μ 相当于规范空间的联络系数 $\Gamma^{\kappa}_{\mu\nu}$，场强 $G_{\mu\nu}$ 相当于曲率张量 $R^{\kappa}_{\lambda\mu\nu}$。同样满足比安基恒等式：

$$\sum_{\rho\mu\nu}D_\rho G_{\mu\nu}=0。$$

其中 $G_{\mu\nu}$ 和规范场的场强。D_μ 是协变微商算符。

鬼场耦合 ghost coupling 相应于鬼场的作用量中，包括鬼场和规范场的耦合项。相应的费曼图如下：



它对 S 矩阵元的贡献是 $-gf^{abc}p_\mu$。其中 g 是耦合常数，f^{abc} 是群结构常数，p_μ 是动量。

规范场的无质量性 masslessness matter of gauge field 要满足规范不变性的要求，规范场必须是无质量的。这就是规范场的无质量性。

非阿贝尔规范场 non-Abelian gauge fields 相应于非阿贝尔群的规范场称为非阿贝尔规范场。

路径积分量子化 path integral quantization 路径积分量子化是一种不同于正则量子化的程序，按照费曼路径积分量子化理论，由初态 i 到末态 j 的任一微观过程的跃迁振幅是该两态之间所有可能路径贡献之和，每条可能的路径对跃迁振幅贡献一个相应的相位因子。它们的和就是生成泛函，任一过程的格林函数

都可以由相应的生成泛函通过泛函微商生成。费曼规则也可由此泛函得到。这种量子化程序特别适用于规范场的量子化。

传播子 propagator 传播子费曼图中的任一内线。按照费曼规则,物质场传播子对 S 矩阵元的贡献是

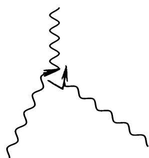
$$\frac{i\delta_{ab}}{\gamma\cdot p-m}。$$

鬼场传播子对 S 矩阵元的贡献是

$$(i\square)^{-1}=\frac{i}{k^2}\delta^{ab}。$$

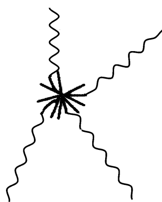
自耦合顶角 self-coupling vertices 规范场的自耦合顶角有两种:

三线耦合顶角:



$$-gf^{abc}[(r_\mu-q_\mu)g_{\nu\rho}+(\pi_\nu-r_\nu)g_{\mu\rho}-(q_\rho-p_\rho)g_{\mu\nu}]$$

四线耦合顶角:



$$-g^2[f^{abe}f^{cde}(g_{\mu\rho}g_{\nu\sigma}-g_{\mu\sigma}g_{\nu\rho})+f^{ace}f^{bed}(g_{\mu\sigma}g_{\rho\nu}-g_{\mu\nu}g_{\rho\sigma})+f^{ade}f^{bce}(g_{\mu\nu}g_{sr}-g_{mr}g_{\sigma\nu})]$$

自发对称性破缺 spontaneous symmetry breaking 按照规范不变性要求,规范场必须是没有质量的。但规范粒子传递的相互作用除电磁场外,一般都是短程的,应该有相当大的质量。为了使规范场具有质量,人们引入希格斯场。当该场作非均匀变换时就会造成短程性的破缺。由于这种破缺是自发发生的,所以叫做自发对称破缺。这种现象也叫做希格斯现象。

规范固定项 gauge fixing term 为了消除多余的规范自由度,在构造生成泛函时要加上规范固定项。通过规范参数确定所选的规范。在非阿贝尔规范场理论中,用法捷耶夫-波波夫技术处理规范固定项时,就会出现鬼场项。

规范不变性 gauge invariance 在规范变换下保持不变的叫规范不变性。规范变换是一种不同于坐标变换的另一种变换。一般它表示为相位的变换。规范变换可以分为整体的和局域的两类,前者和时空无关,后者则与时空有关。另一方面,按照变换群的性质来分,可以分成阿贝尔的和非阿贝尔的两种。

规范原理 gauge principle 按照目前量子场之间相互作用的理论,基本场(包括电子场、夸克场、弱玻色子场等等)之间的相互作用,都是由规范原理决定的规范场传递的。规范原理要求每一个物理量不仅在整体规范变换下保持不变,而且要在局域规范变换下也保持不变。

规范变换 gauge transformation 在 QED 理论中,电磁矢势和标势在下列变换下麦克斯韦方程不变:

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}-\nabla x,\ \phi\to\phi+\frac{\partial\phi}{\partial t}。$$

这就是最简单的规范变换。一般的规范场的规范变换可以写成:

$$\delta(W_{\mu\nu})=-\Lambda\times\boldsymbol{W}_{\mu\nu}+\frac{1}{g}\partial_\mu\Lambda。$$

其中 W_μ是规范势, $W_{\mu\nu}=\partial_\mu W_\nu-\partial_\nu W_\mu+gW_\mu\times W_\nu$ 是相应的规范场。这是阿贝尔规范群的情况。对于非阿贝尔群的情况,以 $SU(3)$群为例,群元素是 $U=\exp\left\{i\frac{\lambda_a}{2}\varepsilon_a\right\}$。$\lambda_a$ 是群的生成元,共有 8 个:$\lambda_1=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$,

$\lambda_2=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$, $\lambda_3=\begin{pmatrix}1&1&0\\1&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix}$,

$\lambda_4=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix}$, $\lambda_5=\begin{pmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix}$,

$\lambda_6=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$, $\lambda_7=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$,

$$\lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}。$$

ε_a是变换参数。脚标 a 是群指标。它们满足下列对易关系：$\left[\frac{\lambda_a}{2},\frac{\lambda_b}{2}\right]=\mathrm{i}f_{abc}\frac{\lambda_c}{2}$。

结构常数 $f_{123}=1, f_{147}=-f_{156}=f_{246}=f_{257}=f_{345}=-f_{367}=\frac{1}{2}, f_{458}=f_{678}=\frac{\sqrt{3}}{2}$。

相应于 $SU(2)$群的生成元是：

$$\tau_1=2\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},$$

$$\tau_2=2\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix},$$

$$\tau_3=2\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}。$$

它们满足下列关系：$[\tau_i,\tau_j]=f_{ijk}\tau_k$，$f_{ijk}$是结构常数。

相应的群元素是：

$$U=\exp\left\{\mathrm{i}\frac{1}{2}\tau^a\Lambda_a\right\}。$$

整体规范变换 global gauge transformation 或称第一类规范变换(gauge transformation of first kind)。规范变换参数与时空无关的叫整体规范。

局域规范变换 local gauge transformation 或第二类规范变换(**gauge transformation of second kind**)规范变换参数与时空有关的叫局域规范变换。也叫第二类规范变换。

盖尔曼-尼希基玛关系 Gell-mann-Nishijima relation 是指电荷 Q 同位旋的第三分量和重子数，奇异数及粲数的关系：

在 $SU(3)$理论中，$Q=I_3+\frac{B+S}{2}=I_3+\frac{Y}{2}$。其中 $Y=B+S$ 叫**超荷(hypercharge)**。

在 $SU(4)$理论中，$Q=I_3+\frac{B+S+C}{2}=I_3+\frac{Y}{2}$。其中 $Y=B+S+C$ 叫**超荷**。

在弱电统一理论中，Weinberg 建议引入**弱超荷(weak hypercharge)** Y_{W}。和弱同位旋的第三分量 I_{W}，并有准盖尔曼-尼希基玛关系(quasi-Gell-mann-Nishijima relation)：$Q=I_{\mathrm{W}}^3+\frac{Y_{\mathrm{W}}}{2}$。

狄拉克场的生成泛函 generating functional for Dirac field 自由狄拉克场的生成泛函定义为：

$$Z[\eta,\bar{\eta}]=\frac{1}{N}\int D\bar{\psi}D\psi\exp\left\{\mathrm{i}\int[\bar{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma\partial-m)\psi(x)+\bar{\eta}(x)\psi(x)+\bar{\psi}(x)\eta(x)]\mathrm{d}x\right\}。$$

其中积分是对四维时空进行的。归一化常数

$$N=\int D\bar{\psi}D\psi\exp\left\{\mathrm{i}\int\bar{\psi}(x)(\mathrm{i}\gamma\cdot\partial-m)\psi(x)\mathrm{d}x\right\}。$$

$\bar{\eta}(x)$是 $\psi(x)$的源项。$\eta(x)$是 $\bar{\psi}(x)$的源项。

相互作用场的生成泛函 generating functional for interacting field 以标量场为例，有相互作用时，生成泛函为：

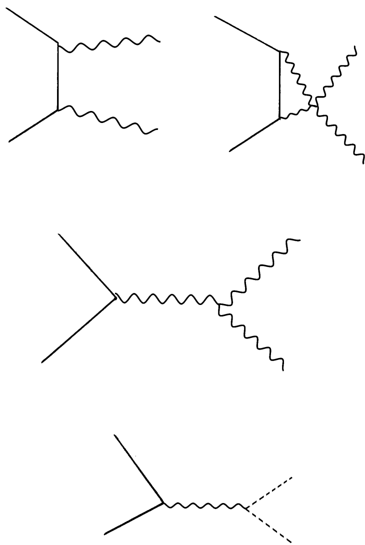
$$Z[J]=N\exp\left\{\mathrm{i}\int\mathscr{L}_{1nt}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\delta}{\delta J}\right)\mathrm{d}x\right\}\cdot Z_0[J]。$$

其中$\mathscr{L}$是相互作用拉格朗日密度，并把场量换成对源的泛函微商。$Z_0[J]$是自由场的生成泛函。

归一化的生成泛函 normalized generating functional 生成泛函定义为有源情况下的从真空到真空的跃迁振幅：$Z[J]=\langle 0,-\infty|\infty\rangle^J$。它自动满足归一化条件：$Z[0]=1$。以标量场为例，相应的生成泛函就应写成：$Z_0[J]=\exp\left\{-\frac{\mathrm{i}}{2}\int J(x)\Delta_F(x-y)J(y)\mathrm{d}y\right\}$。这就是归一化的生成泛函。

代问题 generation problem 在温伯格-萨拉姆弱电统一理论中，若包含重子，手征反常就相互抵消了。这是因为每族的夸克有三种颜色，故有下列关系：$Q_e+Q_{\nu e}+3(Q_u+Q_d)=0$，可重整性恢复了。这一无反常条件揭示了轻子-重子的某种对称性，对其他代也应是适用的。至于自然界到底有多少代的问题，并不是一个理论问题，而是一个实验问题。轻子的第一代是指(μ^-,ν_μ,c,s)。其他还有(τ^-,ν_τ,t,b)。

幺正性和鬼场 unitarity and ghost field 早在1962年费曼就指出，为了在单圈情况下满足幺正性要求，必须引入鬼场。S矩阵的幺正性定义为：对于任意态$|n\rangle$应有$\langle n|S^+S|n\rangle=1$。故$SS^+=S^+S=1$。如果引入反应矩阵$R$，$S=1+\mathrm{i}R$，则幺正性也可表示为：$R-R^+=\mathrm{i}R^+R$。对于QED来说至少到$e^2$阶，由于规范不变的要求，幺正性是可以得到满足的。但对QCD的情况，由于规范场的自相互作用，如果仍然要求保持幺正性，就必须引入鬼场。例如夸克反夸克散射至g^4阶，只有包含下列所有图，才能满足幺正性要求。



其中最后一个图就是有鬼场（以虚线表示）的项。

鬼场-规范场耦合 ghost gauge-field coupling 在非阿贝尔规范理论中，作用量的鬼场部分可以写成：

$$\int D\eta D\bar{\eta}\exp\left\{-\mathrm{i}\int\bar{\eta}^a\prod\eta^a\mathrm{d}x+\mathrm{i}gf^{abc}\int[(\bar{\eta}^a\partial^\mu\eta^b)A_\mu^c+\partial^\mu A_\mu^c(\bar{\eta}^a\eta^b)]\mathrm{d}x\right\}。$$

其中，$\mathrm{i}gf^{abc}\int[(\bar{\eta}^a\partial^\mu\eta^b)A_\mu^c+\partial^\mu A_\mu^c(\bar{\eta}^a\eta^b)]\mathrm{d}x$是鬼场和规范场的耦合项。

鬼场传播子 propagator of ghost field 规范场理论中作用量的等效拉格朗日密度的鬼场部分中，$-\mathrm{i}\int\bar{\eta}^a\prod\eta^a\mathrm{d}x$给出鬼场的传播子：$(\mathrm{i}\Box)^{-1}=\frac{i}{k^2}\delta^{ab}$。相应的费曼图是

$a \quad k \quad b$

胶子 gluon 在量子色动力学中，和电荷类似的色荷也会产生类似于电场的动力学场。这就是胶子场。在非阿贝尔理论中，胶子场就是相应的规范场。

哥尔斯冬定理和哥尔斯冬玻色子 Goldstone theorem and Goldstone boson 一个连续对称性的自发破缺将出现一个无质量的粒子，叫做哥尔斯冬粒子。即哥尔斯冬玻色子。

大统一理论 grand unified theory-GUT 将强相互作用和弱电相互作用统一在一起的理论叫大统一理论。这是人们实现统一描述物理世界的下一个目标，但迄今尚无强有力的证据表明自然界的所有基本相互作用是大统一的。

格拉斯曼代数 Grassmann algebra n维格拉斯曼代数的生成元遵从下列反对易关系：

$$\{c_i,c_j\}\equiv c_ic_j+c_jc_i=0。\quad i,j=0,1,\cdots,n$$

特别是，$c_i^2=0$。以及下列微分，积分运算规则：

左微商$\frac{\partial^L}{\partial c_i}(c_1c_2)=\delta_{i1}c_2-\delta_{i2}c_1$，右微商

$$\frac{\partial^R}{\partial c_i}(c_1c_2)=\delta_{i2}c_1-\delta_{i1}c_2,\left\{\frac{\partial}{\partial c_i},\frac{\partial}{\partial c_j}\right\}=1,\left(\frac{\partial}{\partial c_i}\right)^2=0$$

$$\int\mathrm{d}c_i=0,\int\mathrm{d}c_ic_i=1。$$

引力场 gravitational field 迄今最被普遍接受的引力场理论是爱因斯坦的广义相对论。按照这一理论，引力场是时空弯曲的表现，引力场的量子化实际上就是时间和空间的量子化。而所有其他的量子场都是物质场。另一方面，爱因斯坦的引力场方程是高度非线性的，不满足线性叠加原理。所以，迄今为止，尚未建立得到普遍承认的引力场量子化理论。

引力辐射 gravitational radiation　爱因斯坦的引力场方程预言了引力场的辐射，据此，原则上应该能够观测到单个引力子——引力场的量子。然而，尽管有人宣布已经观测到引力辐射，但尚未被普遍接受。

引力子 graviton　引力子是引力场的量子。

格林函数 Green's function　超前和推迟格林函数(advanced and retarded Green's function)以标量场为例，满足下列方程的函数 $\Delta_F(x)$ 叫标量场的格林函数：$(\Box+m^2)\Delta_F(x)=\delta^4(x)$。当 $x^2>0$ 时，叫推迟格林函数。当 $x^2<0$ 时，叫超前格林函数。

自由标量场的生成泛函 generating functional for free scalar field　自由标量场的生成泛函可以表示成为：

$$Z[J]=N\left\{1-\frac{i}{2}\int J(x)\Delta_F(x-y)J(y)\cdot dxdy+\frac{1}{2!}\left(\frac{i}{2}\right)^2\left[\int J(x)\Delta_F(x-y)J(y)\cdot dxdy\right]^2+\cdots\right\}。$$

对于标量场来说，$\Delta_F(x)=\frac{1}{(4\pi)^4}\int d^4k\frac{e^{-ikx}}{k^2-m^2+i\varepsilon}$ 是标量场的费曼传播子。

古普塔-勃卢勒理论 Gupta-Bleuler formalism　在电磁场的正则量子化理论中，为保持洛伦兹变换下的不变性，可以选定洛伦兹规范：$\partial_\mu A^\mu=0$。这一规范条件在正则量子化时的正确表示是古普塔-勃卢勒首先给出的。$\partial_\mu A^{(+)\mu}|\psi\rangle=0$。在取光子传播方向为第三轴后，上述条件给出物理态中纵光子和标光子混合态的限制条件：$[a^{(0)}(k)-a^{(3)}(k)]|\psi\rangle=0$。这就是古普塔-勃卢勒理论。

霍斯独夫公式 Hausdorff formalism　霍斯独夫公式表示为：

$$e^A Be^{-A}=B+[A,B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\cdots$$

托霍夫-波利亚科夫磁单极子 't Hooft-Polyakov magnetic monopole　和狄拉克磁单极子不同，对于带有对称性自发破缺的非阿贝尔规范场来说，磁单极子是它的一个解，而不是外加进去的。这就是1974年托霍夫和波利亚科夫发现的存在这类磁单极子的理论可能性。以 $O(3)$ 对称群为例，它包含有规范场 $F^a_{\mu\nu}$ 和同位矢量希格斯场 ϕ^a。其拉格朗日函数密度为

$$\mathscr{L}=-\frac{1}{4}F^a_{\mu\nu}F^{\mu\nu a}+\frac{1}{2}(D_\mu\phi^a)(D^\mu\phi^a)-\frac{m^2}{2}\phi^a\phi^a-\lambda(\phi^a\phi^a)^2$$

其中 $F^a_{\mu\nu}=\partial_\mu A^a_\nu-\partial_\nu A^a_\mu+e\varepsilon^{abc}A^b_\mu A^c_\nu$，$D_\mu\phi^a=\partial_\mu\phi^a+e\varepsilon^{abc}A^b_\mu\phi^c$。

它的静态非平庸解所相应的规范势有下列形式：

$$A^a_i=-\varepsilon_{iab}\frac{r^b}{er^2}(r\to\infty),\ A^a_0=0。$$

同时标量场取下列形式：

$$\phi^a=F\frac{r}{r}(r\to\infty),\ F=-\frac{m^2}{4\lambda}。$$

重要的是上述表达式把空间坐标和同位空间指标联系在一起。例如空间 x 方向只有同位空间'1'方向的同位旋。类似地空间 y 方向只有同位空间'2'方向的分量，而空间 z 方向只有同位空间'3'方向的分量。波利亚科夫把它叫做"黑奇霍革解(Hedgehog solution)"。如果重新定义电磁场，使得标量场仅有第三分量：

$$F_{\mu\nu}=\frac{1}{|\phi|}\phi^aF^a_{\mu\nu}-\frac{1}{|\phi|^3e}\varepsilon_{abc}\phi^a(D_\mu\phi^b)(D_\nu\phi^c)。$$

这样定义的电磁场和标量场都只有第三分量：$A^{1,2}_\mu=0$，$A^3_\mu=A_\mu\neq0$；$\phi^{1,2}=0$，$\phi^3=F\neq0$。当标量场在同位空间固定不变时，它给出通常的电磁场，并有径向磁场 $B^k=r^k/er^3$。相应的磁通量为 $\Phi=\frac{4\pi}{e}$。和狄拉克磁单极子量子化条件相比，其磁荷是狄拉克单位的两倍。这就是托霍夫-波利亚科夫磁单极子的磁荷。

螺旋性 helicity　当人们用狄拉克方程描述无质量的费米子时，方程将脱耦成两个独立的关于韦尔旋量的方程：

$$(p_0+\sigma\cdot\boldsymbol{p})\phi_L(p)=0,$$
$$(p_0-\sigma\cdot\boldsymbol{p})\phi_R(p)=0。$$

算符 $\sigma\cdot\boldsymbol{p}$ 测量粒子自旋在其动量方向的分量。这个量就叫做螺旋度。所以韦尔旋量波函数是螺旋度的本征态。一般规定，左手旋量波函数有负的螺旋度，而右手旋量波函数有正的螺旋度。

希格斯现象 Higgs phenomenon　(见"自发

对称性破缺")人们把整体对称性的自发破缺使某种场成为无质量的哥尔特斯冬玻色子,在希格斯机制下消失,并且在定域对称性自发破缺时使规范场获得质量。这种现象叫做希格斯现象。

希格斯场 Higgs field　希格斯场是一种同位旋标量场,$\phi=\begin{pmatrix}\phi^+\\ \phi^0\end{pmatrix}$。具有弱超荷 1 和同位旋第三分量1/2。若将它写成复数的形式,即 $\phi=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_3+i\phi_4)\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1+i\phi_2)\end{pmatrix}$,则含有 ϕ 的拉格朗日函数密度为:

$$\mathscr{L}=(D_\mu\phi)^+(D_\mu\phi)-(m^2/2)\phi^+\phi-\frac{\lambda}{4}(\phi^+\phi)^2。$$

当 $m^2<0$ 时,系统基态就不再是 $\phi=0$ 的状态,而是相对于系统新的基态,系统对称性就会自发破缺。这就是对称性自发破缺机制,即希格斯机制。

同伦路径 homotopic paths　在空间 X 中,路径 a 定义为实参数 s 的连续函数 $a(s)$,即对应于区间 $0\ll s\ll 1$ 中的每一个 s 的值,在 X 空间有一个点 $a(s)$。如果路径 a 连接两点 P 和 Q,并且 $a(0)=P$, $a(1)=Q$。如若 $a(0)=a(1)=P$,则该路径是闭合路径或叫做环路。对于两条闭合路径 $a(s)$和 $b(s)$,如果存在某一函数 $L(t,s)$,并且满足下列条件:$L(0,s)=a(s)$, $L(1,s)=b(s)$,则称这两条路径是同伦的。

同伦群 homotopy group　若引入同伦类的概念,并记为$[a]$,它们当然有相同的端点。对这些同伦类可以定义乘法,$[a][b]=[ab]$。容易看出,上面定义的乘法确定了一个群,叫做空间 X 的基本群,是 1895 年庞伽莱引入的,并把它叫作第一同伦群,记作 $\pi_1(x)$,以表示还有更高阶的同伦群。

煦韦兹测度 Huewitz measure　这是一种关于群空间测度。设对称群是 G,它的两个元素分别是 $gg'\in G$。煦韦兹测度定义为:$dg=d(gg')$。它是在群变换下保持不变的积分测度不变量。

入态,出态 "in" and "out" states　出态和入态分别定义为:

$$|\alpha\rangle_{in}=|\alpha,t\to-\infty\rangle,$$
$$|\alpha\rangle_{out}=|\alpha,t\to+\infty\rangle。$$

瞬子 instanton　这是一种孤立子,它描写一个规范场方程的解。它的 x_4 轴由 $-\infty$ 变到 $+\infty$,由一个属于 $n-1$ 类的真空演化为 n 类的另一个真空。是'tHooft 建议把它叫做瞬子。实际上,扬-米尔斯场的真空是无穷简并的,由无穷多个同伦不等价的真空组成。瞬子解表示由一种真空类到另一种真空类的跃迁。

不变函数 $\Delta(\boldsymbol{x})$ invariant function $\Delta(\boldsymbol{x})$　不变函数定义为:

$$\Delta(x-y)=-\iota\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3 2\omega_k}(e^{-ikx}-e^{ikx})。$$

它是一个在洛伦兹变换下不变的函数。可以用它来表示一些对易关系。$[\phi(x),\phi^+(y)]=i\Delta(x-y)$。当 $x_0=y_0$ 时,上式简化为$[\phi(x),\phi^+(y)]_{x_0=y_0}=0$。不等时,有$[\phi^+(x),\phi^+(y)]=[\phi(x),\phi(y)]=0$。

同位旋 isospin　最早的同位旋概念是在处理核子对称性问题时引入的。人们把质子和中子看做是一个粒子的两种电荷状态,统一用核子二分量旋量的形式来表示。$N=\begin{pmatrix}p\\ n\end{pmatrix}$。它们之间的变换关系用 2×2 的泡利矩阵来表示:$M=\exp\left\{i\frac{\tau}{2}\theta\right\}$, $\Psi\to M\psi$。由它构成的拉格朗日函数在整体 $SU(2)$变换下不变,对应的守恒量就是同位旋守恒。

雅可比恒等式 Jacobi identity　群的结构常数满足下列条件 $c_{lim}c_{mjk}+c_{ljm}c_{mki}+c_{lkm}c_{mij}=0$,这叫雅可比恒等式。

克莱因-戈尔登方程 Klein-Gordon equation　克莱因-戈尔登方程是描写自旋为零的标量粒子的相对论性方程。由于粒子没有自旋,只有一个分量。克莱因-戈尔登方程可以从相对论性质能关系,并用算符代替能量和动量得到,即将 $p^2=p^\mu p_\mu=\frac{E^2}{c^2}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}=m^2c^2$ 中的 E 和 p 代之以 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$和$-i\hbar\nabla$。由此即得:

$$\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2\right)\phi+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\phi=0。$$

若取 $\hbar=c=1$ 的单位制，则克来因-戈尔登方程可以简化为：

$$(\Box+m^2)\phi=0$$

ϕ 就是**克莱因-戈尔登场**。

克莱因-戈尔登算符 Klein-Gordon operator 有时经常把算符 $(\Box+m^2)$ 叫做克莱因-戈尔登算符。

兰姆移动 Lamb shift （见库仑势修正）光子传播子重正化后，在忽略规范项后，将保留有限的修正项：

$$\widetilde{D}'_{\mu\nu}=\frac{-g_{\mu\nu}}{k^2[1+\prod_f(k^2)]}+规范项。$$

其中修正项叫乌黑林项，将会对库仑势给以修正：

$$V(r)=\frac{e^2}{4\pi r}+\frac{e^2}{60\pi^2m^2}\delta^3(r)。$$

这一修正将使氢原子的能级发生变化，对兰姆移动给出重要贡献。兰姆移动是指氢原子原先简并的 $2s_{1/2}$ 和 $2p_{1/2}$ 能级发生分裂。QED 计算预言的 $2s_{1/2}$ 高于 $2p_{1/2}$ 能级。其中 27.1MHz 来自真空极化，理论和实验符合至 0.1MHz。是对重整化理论的卓越的验证。

朗道奇异性 Landau singularity 朗道奇异性是一种 QED 的渐近行为。在 QED 的重整化理论中，为了消除发散项，必须重新定义裸电荷：$e_B=e\mu^{\varepsilon/2}\frac{Z_1}{Z_2Z_3^{1/2}}=e\mu^{\varepsilon/2}Z_3^{-1/2}$。由此可以得到：$\mu=\mu_0\exp\left\{\frac{6\pi^2}{e^2(\mu_0)}\right\}$。这就是朗道奇异性。

勒让德变换 Legendre transformation 这里的勒让德变换是指连通图生成泛函 W 和顶角函数 Γ 之间的变换关系。事实上，两者满足下列变换关系：

$$W[J]=\Gamma[\phi]+\int dx J(x)\phi(x)。$$

这就是勒让德变换。

轻子 lepton 是对电子、μ 介子、τ 介子及它们的中微子的通称，以区别于重子和光子。但对于不同的轻子，还应用不同的轻子数来加以区别。例如电子轻子数、μ 介子轻子数和 τ 介子轻子数。每种轻子和它们的中微子的轻子数是同一类的。在任何反应中，同一类的轻子数是守恒的。

轻子数 lepton number 轻子数既用来区别轻子和重子，也区别不同种类的轻子。

李群 Lie group 李群一种连续群，它有无穷多个元素，是群参数的连续函数。例如转动群是以欧拉角为参数表示的转动，其生成元是：

$$J_z=\frac{1}{i}\frac{dR_z(\theta)}{d\theta}\Big|_{\theta=0}=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},$$

$$J_x=\frac{1}{i}\frac{dR_x(\phi)}{d\phi}\Big|_{\phi=0}=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},$$

$$J_y=\frac{1}{i}\frac{dR_y(\psi)}{d\psi}\Big|_{\psi=0}=\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix}。$$

无穷小转动生成元可以写为：

$$R_z(\delta\theta)=1+iJ_z\delta\theta,$$
$$R_x(\delta\phi)=1+iJ_x\delta\phi,$$
$$R_y(\delta\psi)=1+iJ_y\delta\psi,$$

有限转动生成元为：

$$R_z(\theta)=[R_z(\delta\theta)]^N=\exp\{iJ_z\theta\},$$
$$R_x(\phi)=[R_x(\delta\phi)]^N=\exp\{iJ_x\phi\},$$
$$R_y(\psi)=[R_y(\delta\psi)]^N=\exp\{iJ_y\psi\}。$$

李代数 Lie algebra 以转动群为例，其生成元满足对易关系：

$$[J_x,J_y]=iJ_z,[J_y,J_z]=iJ_x,$$
$$[J_z,J_x]=iJ_y。$$

类光区间 light-like interval 在四维时空，相对论不变的线元是 $ds^2=c^2dt-(dx^2+dy^2+dz^2)$。类光区间是指 $ds^2=0$ 的区间，$ds^2>0$ 的区间叫类时区间；$ds^2<0$ 的区间叫类空区间。

类光粒子 light-like particles 类光粒子是指四维能量-动量 $p^2=0$ 的粒子。

纵光子 longitudinal photon 若取光子动量

方向为第3轴，则极化矢量是 $\varepsilon^{(3)}$ 的光子叫纵光子。

标光子 scalar photon 标光子也叫类时光子，若取光子动量方向为第3轴。它的极化矢量是 $\varepsilon^{(0)}$。

横光子 transverse photon 若取光子动量方向为第3轴，则极化矢量是 $\varepsilon^{(2)}$，$\varepsilon^{(3)}$ 的光子叫横光子。

LSZ 条件 LSZ condition LSZ 条件就是弱渐近条件：对于希尔伯特空间的任意态 $|a\rangle$，$|b\rangle$ 必须满足下列条件：

$$\lim_{t\to\pm\infty}\langle a|\phi(x)|b\rangle=\langle a|\phi_{out,in}(x)|b\rangle$$

麦克斯韦方程 Maxwell equations 最早的麦克斯韦方程是以电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的形式出现的：$\mathrm{div}\,\boldsymbol{B}=0$，$\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}=\rho$ $\quad\mathrm{curl}\ \boldsymbol{E}+\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}=0$，$\mathrm{curl}\ \boldsymbol{B}-\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}=\boldsymbol{j}$（Heaviside-Lorentz 自然单位制 $e^2/4\pi hc=\alpha=1/137$）。

麦克斯韦方程的洛伦兹协变形式是以电磁四维势的形式出现的：$A^{\mu}=(\phi,\boldsymbol{A})$。其中 ϕ 和 $\boldsymbol{A}$ 定义为：$\boldsymbol{B}=\mathrm{curl}\boldsymbol{A}$，$\boldsymbol{E}=-\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}-\nabla\phi$。在此表示下，麦克斯韦方程可以写成反对称张量的形式：$\partial_{\mu}F^{\mu\nu}=j^{\nu}$，以及 $\partial_{\mu}\widetilde{F}^{\mu\nu}=0$。其中

$$F^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0 & -E^1 & -E^2 & -E^3\\ E^1 & 0 & -B^3 & B^2\\ E^2 & B^3 & 0 & -B^1\\ E^3 & -B^2 & B^1 & 0\end{pmatrix},$$

$$\widetilde{F}^{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0 & -B^1 & -B^2 & -B^3\\ B^1 & 0 & E^3 & -E^2\\ E^2 & -E^3 & 0 & E^1\\ B^3 & E^2 & -E^1 & 0\end{pmatrix}$$

后者是前者的对偶张量。

曼斯纳效应 Meissner effect 在规范场理论中，曼斯纳效应可以看做是阿贝尔-希格斯模型的一个例子。在此模型下，自发破缺机制将使电磁场获得质量。$\Box A_{\mu}=-k^2A_{\mu}$，使得磁场的穿透深度有限，$\lambda_{穿透}=1/k\approx10^{-6}\mathrm{cm}$。

度规张量 metric tensor 度规张量有两种形式，一是协变的，一是逆变的。两者形式相同，但起着不同的升降指标的作用——构成相对论不变量。

$$g_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}=g^{\mu\nu}。$$

它们可以将协变矢量和逆变矢量联系起来：

$$x_{\mu}=g_{\mu\nu}x^{\nu}=g_{\mu0}x^0+g_{\mu1}x^1+g_{\mu2}x^2+g_{\mu3}x^3$$

这里采用爱因斯坦求和约定，即对重复的上下指标从0到3求和。

中性流过程 neutral current process 在弱电统一标准模型中，两个顶角之间是通过中间玻色子 $W^{\pm}$ 和 Z 联系起来的，其等效相互作用可以写成：

$$H_{\mathrm{int}}=\frac{g^2}{8}\bar{\nu}_{\mu}\gamma^{\kappa}(1-\gamma_5)\mu(prop)_{\kappa\lambda}\bar{e}\gamma^{\lambda}(1-\gamma_5)\nu_e。$$

它在小动量交换时，传播子 $(prop)_{\kappa\lambda}$ 简化为 $\frac{g_{\kappa\lambda}}{M_W^2}$。相互作用哈密顿量可以简化为流流相互作用的形式：

$$H_{\mathrm{int}}=\frac{g^2}{8M_W^2}j_{\mu}^{\lambda+}j_{e\lambda}。$$

和费米的点相互作用形式一样。

中微子质量 neutrino mass 中微子的质量问题是一个至今尚未解决的问题。如果中微子的质量为零，则它的运动方程就是外尔方程，否则就应该用狄拉克方程来描写。另一方面，中微子的质量在宇宙学方面还有很重要的意义。这是因为按照大爆炸理论，中微子应在宇宙演化的早期脱耦，使得宇宙间存有较大的粒子数密度。它有无质量，以及质量的大小将直接影响宇宙的演化规律。

诺宙定理 Noether's theorem 诺宙定理是说，如果作用量在时空和场量的重参数化时不变，即作用量在某个群变换下保持不变，则存在某种由场量和它对时空变量的导数构成的守恒量，它在该群的作用下保持不变。

扬-米尔理论的渐近自由 asymptotic freedom of Yang-Mills theory 在 ϕ^4 理论的重整化理论中，单粒子不可约函数 $\Gamma_r^{(n)}$ 满足重整化群方程：

$$\left[\mu\frac{\partial}{\partial\mu}+\beta(g)\frac{\partial}{\partial g}-n\gamma(g)+m\gamma_m(g)\frac{\partial}{\partial m}\right]\cdot$$

$\Gamma^{(n)}=0$。

其中 $\beta(g)$ 是可变化耦合常数，在 $\varepsilon\to 0$ 极限下，它和夸克味量子数有关：

$$\beta(g)=\frac{g^3}{16\pi^2}\left(-11+\frac{2n_F}{3}\right)。$$

其中 n_F 是夸克的味量子数。当 $n_F\leqslant 16$ 时，$\beta<0$，即耦合常数随质量（动量）的增加而减小。因此理论是渐近自由的。

法狄也夫-波波夫方法 Faddeev-Popov method 这是一种已经得到普遍接受的妥善处理多余的规范空间的方法。其要点是通过引入格罗兹曼标量场变量，用某种等效拉格朗日函数来补偿规范固定条件。这就是法狄也夫-波波夫鬼项。利用此方法，可以证明扬-米尔斯理论的可重整性。这是因为单粒子不可约函数 Γ 在重标度规范场、鬼场以及源项后，在 $\varepsilon\to 0$ 时是逐级收敛的。这一要求已经包含在斯拉夫诺夫-泰勒恒等式中。（见斯拉夫诺夫-泰勒恒等式条）

正规序 normal ordering 正规序是一种有用的运算，它将所有的湮没算符移到产生算符的右边。以利于直接写出相应于待研究过程的 S 矩阵元。

***n* 点函数 *n*-point functions** n 点函数 $\tau(x_1,x_2,\cdots,x_{2n+1})=\frac{1}{\mathrm{i}}\times\frac{\delta}{\delta J(x_1)}\frac{1}{\mathrm{i}}\ \frac{\delta}{\delta J(x_2)}\cdots\frac{1}{\mathrm{i}}\ \frac{\delta}{\delta J(x_{2n+1})}\times Z_0[J]$。

单粒子不可约图 one-particle irreducible (1PI) graph 不能通过割断任一条线将一个费曼图分成两个的叫单粒子不可约图。反之叫单粒子可约图。

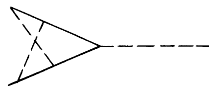
量子电动力学中的发散和原始发散图 divergences and primitive divergence diagrams in QED theory QED 研究的对象是带电物质的电磁相互作用。相应的发散图有电子自能，光子自能（即真空极化）和顶角（包括两电子一光子顶角和三光子顶角）。按照费曼规则，可以分别写出各自对应的 s 矩阵元。由于它们都存在圈图，故都是发散的。它们就是 QED 中的原始发散图。它们各自的发散程度是不同的。电子自能的表观发散度是 1，光子自能的表观发散度是 2，而两电子一光子顶角的表观发散度是对数发散。三光子顶角的表观发散度是 2，但根据夫雷定理，它和其时间反演图相抵消。

表观发散度 superficial degree of divergences 按照费曼规则，人们可以用相应于某一过程的费曼图中的外线数来确定它的发散程度，叫做表观发散度。就 d 维时空来说，对应为 $D=dL-2I$。其中 L 是回路数，I 是内线数。考虑到每个顶角都满足能量动量守恒，有关系 $L=I-n+1$。所以对于确定的理论就可以消去 L 和 I 而代之于外线数 E。例如 ϕ^4 理论，有 $4n=E+2I$。故它的表观发散度是 $D=d+(1-d/2)E+n(d-4)$。它在四维时空中的表观发散度是 $D=d-E$，只与外线数有关。

紫外发散 ultraviolet divergences 以自由标量粒子为例，根据费曼规则，它的二阶 s 矩阵元在动量空间是下列积分：$g^2\int\frac{\mathrm{d}^4q}{(2\pi)^4}\cdot\frac{1}{q^2-m^2}$。其中 g 是耦合常数。该积分是发散的，因为在积分号下分子上是 q 的四次方，而分母上是 q 的两次方。积分区间趋于无限大时是平方发散的。这种发散叫紫外发散。

红外发散 infrared divergences 若费曼图的圈图的费曼积分在 q 趋于零时是发散的，这种积分就叫做红外发散。

交缠发散 overlapping divergences 它是重正化理论中一种难以处理的发散现象，出现在二阶顶角图中，如图。



相应的矩阵元是

$$\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}k_1\mathrm{d}k_2}{k_1^2k_2^2(p-k_1-k_2)^2}。$$

其中有两个积分变量和两个圈图。虽然它的总发散度是 2，但由于两个圈图绞缠，无法将两个变量的发散分离开来。在处理这种发散问题时，要考虑理论中的其他条件。例如在 QED 中，由于不变性，它并不带来任何麻烦，而对于 ϕ^4 理论来说，就比较困难。（见 ϕ^4 理论）

狄拉克方程的粒子解释 particle interpretation of Dirac equation 狄拉克方程的解有两个。其中一个能量是正的，一个能量是负的。对于负能态的解释是狄拉克的一个重要贡献。他根据电子自旋是 1/2 的特点，认为负能态是被完全占满的(即所谓狄拉克海)，泡利不相容原理将防止任何更多的电子进入负能态的海。因此就不会发生辐射无限多能量的问题。现在人们普遍认为，这些负能态的粒子就是反粒子。对电子来说就是正电子。

克莱因–戈尔登方程的粒子解释 particle interpretation of Klein-Gordon equation 和狄拉克方程类似，克莱因–戈尔登方程也有负能解。同样可以把它解释为反粒子。

粒子数算符 particle number operator 粒子数算符定义为 $N(k)=a^{+}(k)a(k)$。利用对易或反对易关系容易证明，该算符的本征值是相应状态的粒子数。以标量场为例，

$$N(k)\,|\,n(k)\rangle=n(k)\,|\,n(k)\rangle。$$

泡利矩阵 Pauli matrix 泡利矩阵有三个，分别是：

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \sigma_y=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},$$

$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}。$$

旋量波函数 spinor 狄拉克旋量波函数定义为：$\psi(p)=\begin{pmatrix}\phi_R(\boldsymbol{p})\\\phi_L(\boldsymbol{p})\end{pmatrix}$。

泡利–卢巴斯基赝矢量 Pauli-Lubanski pseudovector 泡利–卢巴斯基赝矢量定义为：

$$W_\mu=-\frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}J^{\nu\rho}P^\sigma。$$

其中，$\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$是完全反对称张量，$J^{\nu\rho}$是角动量张量，$P^\sigma$ 是四维动量。

微扰论 pertubation theory 在路径积分量子化理论中，当位势 V 对时间的积分较 h 小时，可作下列微扰展开：

$$\exp\left[\frac{-\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}V(x,t)\mathrm{d}t\right]$$

$$=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f}V(x,t)\mathrm{d}t-\frac{1}{2!\hbar^2}\left[\int V(x,t)\right]^2+\ldots$$

这就是微扰展开。当把它代入传播子 $K(x_f,t_f;x_i,t_i)$时，就可以得到

$$K=K_0+K_1+K_2+\ldots$$

其中，

$$K_0=N\int\left[\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\frac{1}{2}m\dot{x}^2\mathrm{d}t\right)\right]Dx。$$

写成分立的形式后可以计算出自由传播子：

$$K_0(x_ft_f;x_it_i)=\theta(t_f-t_I)\cdot\left(\frac{m}{\mathrm{i}\hbar(t_f-t_i)}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\exp\left[\frac{\mathrm{i}m(x_f-x_i)^2}{2\hbar(t_f-t_i)}\right]。$$

类似地可以写出：

$$K_1(x_ft_f;x_it_i)=K_0(x_ft_f;x_it_i)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\cdot$$

$$\int K_0(x_ft_f;x_1t_1)V(x_1,t_1)K_0(x_1t_1;x_2t_2)$$

$$\mathrm{d}x_1\mathrm{d}t_1-\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int K_0(x_1t_1;x_it_i)V(xt)K$$

$$(xt;xt)V(x_2t_2)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}t_1\mathrm{d}x_2\mathrm{d}t_2+\ldots$$

可以写到任意项。

正频解 positive frequency solution 在正则量子化时，场量的动量空间展开中包括正能态和负能态。其中和正能态相应的是正频率解。

泼洛卡方程 Proca equation 泼洛卡方程是质量不等于零的矢量场方程。可以写成：

$$\partial_\mu F^{\mu\nu}+m^2A^\nu=0,\ F^{\mu\nu}=\partial^\mu A^\nu-\partial^\nu A^\mu。$$

以及$(\Box+m^2)A^\mu=0$。

量子化 quantization 在量子场理论中，场量既满足相对论波动方程，又具有粒子性。要显示量子场的粒子性，可以将场量在动量空间作平面波展开。这一做法就是量子场的量子化。目前一般有两种量子化理论，一是正则量子化理论，一是路径积分量子化理论。

正能态和负能态的投影算符 projection operator for positive and negative energy states 旋量场的投影算符有两种，一是正能态的，一是负能态的，分别定义为：

$$P_+=\sum_\alpha u^{(\alpha)}(p)\bar{u}^{(\alpha)}(p)$$

$$=\frac{\gamma\cdot p+m}{2m},$$

$$P_-=\sum_\alpha v^{(\alpha)}(p)\bar{v}^{(\alpha)}(p)$$

$$=\frac{-\gamma\cdot p+m}{2m}。$$

传播子 propagator 在量子场理论的微扰

论中,相应于任何过程的 S 矩阵元可以用费曼图来表示。费曼图由外线、内线和顶角组成。其中内线就是相应粒子的传播子。它来自微扰展开中算符的收缩,例如在动量空间,费米子内线对 S 矩阵元的贡献就是

$$S_f(p)=\frac{1}{4(\pi)^4}\frac{\mathrm{i}}{p^2-m^2+\mathrm{i}\varepsilon}。$$

量子电动力学的真空极化 vaccum polarisation in QCD 真空极化也叫光子自能,它是对光子线的二阶修正。按照费曼规则,真空极化图的 S 矩阵元是

$$\mathrm{i}\Pi^{\mu\nu}(k)=(\mathrm{ie})^2\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\times$$
$$\mathrm{tr}\left(\gamma^\mu\frac{\mathrm{i}}{\gamma_\lambda\cdot p^\lambda-m}\gamma^\nu\frac{\mathrm{i}}{\gamma_\lambda p^\lambda-\gamma_\lambda k^\lambda-m}\right)$$

它的表观发散都是平方发散。

正规化和维度正规化 regularization and dimensional regularization 正规化是孤立费曼积分中的发散部分的方法,以便于用适当的方式将它们吸收到物理量中去(物理量的重整化)。目前有好几种正规化的方法。最直观也是最早采用的是截断(cut-off)法,一个特殊的例子是对光子传播子的正规化。它将光子传播子由 $\frac{1}{k^2}\to\frac{1}{k^2}-\frac{1}{k^2-\Lambda^2}$。于是,只要让 $\Lambda\to\infty$ 原来发散的积分就收敛了,因为这时的积分因子已经变成 $\frac{-\Lambda^2}{k^2(k^2-\Lambda^2)}$。泡利-维拉正规化也类似,它引进一个假想的质量为 M 的场,然后让 $M\to\infty$。同样可以达到孤立发散部分的目的。在这两种做法中,同时还会留下有限的部分。

然而,若要把这两种方法用到规范理论中时,就会因引入动量或质量而从根本上违反规范不变性要求。因此在规范理论特别是非阿贝尔规范理论中,维度正规化就显得更为妥当。因为它不用引入截断量,而用不同维度空间之间的延托,来孤立费曼积分中的发散部分。目前已被广泛用来处理规范理论中的发散问题。

维度正规化在处理发散的费曼圈图积分时,先把该积分看做是 d 维动量空间的积分,然后让 d 趋于 4。这时,单圈图的奇点就是 $d-4$ 的简单极点,从而可以将发散部分分离出来。为此首先要根据拉格朗日函数在 d 维空间各物理量的维度将它推广到 d 维空间。由于在 d 维空间场量 ψ 和 A_μ 的量纲分别是:$[\psi]=\frac{d-1}{2}$,$[A_\mu]=\frac{d}{2}-1$。要保持拉格朗日函数密度的量纲是 d,就必须在狄拉克场和规范场的耦合常数 e 之前乘一个质量项如下:$\mu^{2-\delta/2}$。必须注意的是,这里只对内线推广到 d 维空间,而外线波函数等仍保持在四维空间。现在拉格朗日函数密度为:

$$\mathscr{L}=\mathrm{i}\bar\psi\gamma^\mu\partial_\mu\psi-\mathrm{m}\bar\psi\psi-\mathrm{e}\mu^{2-\mathrm{d}/2}A^\mu\bar\psi\gamma_\mu\psi-$$
$$\frac{1}{4}(\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu)^2-\frac{1}{2}(\partial_\mu A^\mu)^2。$$

由此拉格朗日函数密度决定的电子自能为:

$$\sum(\mathrm{p})=-\mathrm{ie}^2\mu^{4-d}\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^{\mathrm{d}}}\gamma_\mu\times$$
$$\frac{1}{\gamma_\lambda p^\lambda-\gamma_\lambda k^\lambda-m}\gamma_\nu\frac{g^{\mu\nu}}{k^2}。$$

再利用 d 维空间 γ 矩阵的反对易关系及求积公式,可以算得:发散项以分母上的 $\varepsilon=4-d$ 表示。它来自 d 维空间积分中的 $\Gamma(2-d/2)$ 函数。

$$\Sigma(p)=\frac{\mathrm{e}^2}{8\pi^2\varepsilon}(-\gamma_\lambda p^\lambda+4m)+\text{有限项}。$$

类似地,可以算得真空极化

$$\Pi_{\mu\nu}(k)=\mathrm{i}\mu^{4-d}\mathrm{e}^2\int\frac{\mathrm{d}^4p}{(2\pi)^4}\times$$
$$\mathrm{tr}\left[\gamma_\mu\frac{1}{\gamma_\lambda p^\lambda-m}\gamma_\nu\frac{1}{\gamma_\lambda p^\lambda-\gamma_\lambda k^\lambda-m}\right]$$

类似的计算给出:$\Pi_{\mu\nu}(k)=\frac{\mathrm{e}^2}{6\pi^2\varepsilon}(k_\mu k_\nu-g_{\mu\nu}k^2)$ +有限项。

最后一个是高阶顶角

$$-\mathrm{ie}\mu^{2-d/2}\Lambda_\mu(p,q,p')$$
$$=(-\mathrm{ie}\mu^{2-d/2})^2\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^{\mathrm{d}}}\gamma_\nu\frac{\mathrm{i}}{\gamma_\lambda p^\lambda-\gamma_\lambda k^\lambda-m}\cdot$$
$$\gamma_\mu\frac{\mathrm{i}}{\gamma_\lambda p^\lambda-\gamma_\lambda k^\lambda-m}\gamma_\rho\frac{-\mathrm{i}g^{\nu\rho}}{k^2}。$$

将它写成两项 $\Lambda_\mu=\Lambda_\mu^{(1)}+\Lambda_\mu^{(2)}$。其中第一项可以类似地得到

$$\Lambda_\mu^{(1)}=\frac{\mathrm{e}^2}{8\pi^2\varepsilon}\gamma_\mu+\text{有限项}。$$

而第二项本身就是收敛的。可以直接积分。这就是三个原始发散图的维度正规化。

瓦德恒等式 Ward identity 在量子电动力学中，瓦德恒等式是关于电子传播子和顶角函数之间的贡献的恒等式：

$$q^{\mu}\Gamma_{\mu}(p,q,p+q)=S'^{-1}_{F}(p+q)-S'^{-1}_{F}(p)。$$

当 $q^{\mu}\to 0$ 时，就是瓦德恒等式：

$$\frac{\partial S'^{-1}_{F}}{\partial p^{\mu}}=\Gamma_{\mu}(p,0,p)。$$

它的最低阶是裸传播子 S_F。它的逆是 $S_F^{-1}=\gamma_{\mu}p^{\mu}-m$。同时，$\frac{\partial S_F^{-1}}{\partial p^{\mu}}=\gamma^{\mu}$。

量子味动力学 quantum flavour dynamics (QFD) 人们常把弱相互作用的规范理论叫做量子味动力学。用不同的味量子数来标记不同种的夸克。在不同的规范理论中，味量子数是不同的。例如在 $SU(3)$理论中，最大的味量子数是 16 个。

量子色动力学 quantum chromodynamics (QCD) 为了显示夸克理论的对称性，人们对每个不同的夸克除给以不同的味量子数外。还给以不同的色量子数，以解决由夸克组成的重子的所谓夸克的统计问题。保证夸克依然是遵守费米-狄拉克统计。另一方面，为了能够说明夸克禁闭问题，人们一般采用非阿贝尔规范场来描写夸克之间的相互作用。但在使用哪种群的规范场才合适的问题上，尚未完全确定。

量子电动力学 quantum electrodynamics (QED) 量子电动力学是最早发展的量子场理论，也是目前最完善的一种量子场理论。它是关于粒子之间有电磁相互作用时的量子场理论。从规范场理论来说，由于电磁场是 $U(1)$规范场，是一种阿贝尔规范场，是一种最简单的规范场理论。按照量子电动力学算得的结果和实验结果非常符合。例如电子的反常磁矩，理论值是$(1159652.4\pm0.4)\times10^{-9}$，而实验值是$(1159652.4\pm0.2)\times10^{-9}$。其符合程度是惊人的。

夸克模型 quark model 夸克模型是用来描写重子结构的一种理论模型。按照这种模型，强子是由至少六种不同的夸克组成：上(u)、下(d)、奇(s)、粲(c)、顶(t)和底(b)。每种夸克又有颜色红(R)、白(W)、蓝(B)。重子是三个夸克的束缚态，而介子是由夸克和反夸克组成。

夸克禁闭 confinement of quark 夸克模型在描写强子动力学行为方面取得很大的成功，但实验上，迄今从未观测到自由的夸克。这就是著名的夸克禁闭困难。人们相信，自然界一定存在某种机制，使得夸克只能以三夸克和夸克反夸克的组合存在。解决夸克禁闭困难仍然是粒子物理学面临的重要课题。

夸克自能 self-energy of quark 在 $SU(3)$规范理论中，夸克自能可以由下列费曼图决定的 S 矩阵元表示：$\mathrm{i}\sum^{ab}(p)=-g^2\mu^{4-d}\cdot\int\frac{\mathrm{d}^4k}{(2\pi)^d}\gamma_{\mu}\frac{1}{\gamma_{\lambda}\cdot p^{\lambda}-\gamma_{\lambda}\cdot k^{\lambda}-m}\gamma_{\nu}\frac{g^{\mu\nu}}{k^2}(T^c)_{ad}(T^c)_{db}$。

R 规范 R gauge 即可重整化规范。如果规范固定项取 t'Hoof 规范，写成：

$$\mathscr{L}_{\mathrm{GF}}=\frac{1}{2\xi}(\partial_{\mu}A^{\mu}+\xi M\phi_2)^2。$$

则在 ξ 有限，当 $k\to\infty$时，矢量介子传播子 $D_{\mu\nu}\to k^2$，可重整性得到恢复。这就是 R 规范。

约化公式 reduction formula 见“S 矩阵”条。

可重整性 renormalizability 一个理论的可重整性是指，可以用有限个重整化参数将 S 矩阵元中的发散部分分离出来，并吸收到某个物理量中。

重整化常数 renormalization constant 人们把吸收了发散部分的物理量叫重整化常数。一般有重整化质量，重整化耦合常数等。

重整化质量 renormalized mass 以 ϕ^4 理论为例，重整化质量 $m_1=m^2/(1+g/16\pi^2)$。其中 m 是裸质量，g 是耦合常数。

***R* 矩阵 *R* matrix** 即反应矩阵。定义为 $R=\mathrm{i}(1-S)$。其中 S 是 S 矩阵。

变动耦合常数 running coupling constant 见“渐近自由”和“杨-米尔斯理论的渐近自由”条。

骨架图 skeleton diagram 没有圈图的费曼图叫做骨架图。

斯拉夫诺夫-泰勒恒等式 Slavnov-Tylor identity $\int\mathrm{d}x\left[\frac{\delta\Gamma'}{\delta u^{a\mu}}\frac{\delta\Gamma'}{\delta A^a_{\mu}}+\frac{\delta\Gamma'}{\delta\nu^a}\times\frac{\delta\Gamma'}{\delta\eta^a}\right]=0$。

其中 $\Gamma' = 1 - \frac{g}{2\alpha}\int \mathrm{d}x(\partial^{\nu}A^{a})^{2}$。

S 矩阵　S-matrix　S 矩阵即散射矩阵，定义为：

$$S = \langle f, t\to\infty \mid i, t\to -\infty\rangle。$$

在路径积分量子化理论中，S 矩阵可以写成下列形式：

$$S = N\left\{\exp\left[\int \phi_{in}(z)K\frac{\delta}{\delta J(z)}\mathrm{d}z\right]\right\}Z[J]|_{J=0}。$$

其中 N 是正规乘积算符。这就是泛函形式的约化公式。

自旋和统计　spin and statistics　粒子的自旋和所遵从的统计规律有密切关系。自旋 $\frac{1}{2}\hbar$ 及它的奇数倍的粒子遵从费米-狄拉克统计，自旋为零和整数倍 ħ 的粒子遵从玻色-爱因斯坦统计。

自旋算符　spin operator　自旋算符定义为

$$S = \frac{1}{2}\Sigma \equiv \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\sigma & 0\\ 0 & \sigma\end{pmatrix}。$$

其中 σ 是泡利矩阵。

自发对称性破缺　spontaneous symmetry breaking　对称性的自发破缺理论认为，系统的基态并不是场量等于零的状态，而是在其绝对值为某个常数之处，如果希格斯场的质量参数是负值，于是希格斯场的真空期望值就等于该常数。相对于新的真空，系统的对称性就破缺了。这就是对称性的自发破缺。在规范场理论中，这一理论解决了规范不变性要求规范场质量必须是零的困难，使得在发生自发破缺后，传递相互作用的胶子获得质量。

强相互作用　strong interaction　最早的强相互作用理论把传递这种相互作用的量子当作是 π 介子，而且还根据坂田模型推测它的质量应是 200 MeV/C²，π^{+} 于 1947 年被发现，测得的质量是 140 MeV/C²。这一结果被当时认为是坂田理论的一大成就。现在知道，强相互作用是胶子传递的夸克之间的相互作用，是自然界四种基本相互作用中最强的一种相互作用。

θ-真空（θ-vacua）和 CP 不变性（CP invariance）为了解释 CP 不守恒，人们考虑所谓 θ 真空。θ-真空定义为：

$$|vac\rangle_{\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|vac\rangle_{n}。$$

其中 n 是标记同伦类的整数。其特性由特殊的 θ 值表征，系统 $e^{in\theta}$ 保证展开态在规范变换 g_1 下的不变性。算符 g_1 可使展开态作下列变换：

$|vac\rangle_{n}\to|vac\rangle_{n+1}$ 以及 $|vac\rangle_{\theta}\to e^{-I\theta}|vac\rangle_{\theta}$。

这里的规范变换改变了态的同伦类，故有时把它叫做“大”规范变换。相应的“小”规范变换是指那些连续地变为恒等变换而不改变其类的变换。由此可见，θ 真空有下列特性：当 θ≠0 时，该真空态将是复数的。它在时间反演变换下将不再守恒。而由 CPT 定理可知，CP 也将是不守恒的。同时，在下列宇称变换下 $g_1\to(g_1)^{-1}$ 下，除非 θ=0，否则，宇称 P 也将是破缺的。物理上观测到的 T 破缺的量级是 $\theta<10^{-5}$。但为什么该值如此之小而又不等于零，至今尚未找到满意的解释。

时序算符　time order operator　时序算符定义如下：

$$T[A(t_1)B(t_2)] = \begin{cases} A(t_1)B(t_2) \text{如果 } t_1 > t_2, \\ B(t_2)A(t_1) \text{如果 } t_1 < t_2。\end{cases}$$

求迹公式　trace formulae　γ 矩阵求迹运算的基本法则如下：

①$\mathrm{Tr}1=4$，②$\mathrm{Tr}(\gamma\cdot a)(\gamma\cdot b)=4a\cdot b$，③$\mathrm{Tr}(\gamma\cdot a)(\gamma\cdot b)(\gamma\cdot c)(\gamma\cdot d) = -\mathrm{Tr}(\gamma\cdot b)(\gamma\cdot a)(\gamma\cdot c)(\gamma\cdot d)+2a\cdot b\mathrm{Tr}(\gamma\cdot c)(\gamma\cdot d)$

树近似　tree approximation　在对等效势的圈图展开时，在树近似下，等效势和经典势是一样。故树近似就是经典近似。

U 项　Uehling term　（见库仑势修正）它是光子传播子的辐射修正的一部分。

$$\tilde{D}'_{\mu\nu} = \frac{-g_{\mu\nu}}{k^2}\left[1 - \frac{e^2}{60\pi^2}\frac{k^2}{m^2}\right] + O(k^4)。$$

其中第二项就是乌黑林项。表现为对库仑势的修正为

$$\frac{e^2}{4\pi r}\to\frac{e^2}{4\pi r}+\frac{e^2}{16\pi^2 m^2}。$$

真空期望值　vacuum expectation value　场量 φ 的真空期望值定义为：$|\langle 0|\phi|0\rangle|^2$。

真空图　vacuum graph, diagram　没有外线的费曼图叫真空图。

真空简并 vacuum degenerate 在量子场理论中，真空态就是基态。但真空并不是什么也没有的状态，而是有着非常丰富的结构。原则上，对每一种量子场都可以定义一个真空态。因此量子场论中的真空态是简并的。

矢量势 vector potential 矢量势是四维电磁势的一部分：$A^{\mu}=(\phi,\boldsymbol{A})$中的 $\boldsymbol{A}$。

顶角函数 vertex function 两点顶角函数定义为：

$$G_c^{(2)}\Gamma^{(2)}(p)=i。$$

也可以用电子自能来表示：

$$\Gamma^{(2)}(p)=p^2-m^2-\sum(p)。$$

中间玻色子 intermediate boson 按照弱电统一理论，弱作用是通过中间玻色子传递的。在弱电统一标准模型中，中间玻色子共有三个，$W^{\pm}$玻色子就是其中带电的中间玻色子。另一个是 Z-玻色子(Z-boson)是中性的，它的质量为 $M_Z=89.3\mathrm{GeV}/c^2$。

弱超荷 weak hypercharge 弱超荷是温伯格为了在弱电统一理论中保持准盖尔曼-尼希基玛关系而引入的一个量子数。左旋态的弱超荷 $Y_W=-1$，右旋态的弱超荷 $Y_W=-2$。

温伯格角 Weinberg angle 在弱电统一理论中，两种作用的耦合常数 e 和 g 之间有下列关系：$e=g\sin\theta_W$。θ_W 就叫温伯格角。

温伯格定理 Weinberg's theorem 如果费曼图的发散度以及它的所有子图的发散度都是负的，则该费曼图将是收敛的。

外尔方程 Weyl equation 当旋量场是无质量的时候(例如中微子)，按照旋量场的二分量理论，可以将四分量的旋量波函数分成左旋和右旋两个分量 $\phi_L\phi_R$，它们分别满足的方程就叫外尔方程：

$$(p_0+\sigma\cdot\boldsymbol{p})\phi_L=0$$

$$(p_0-\sigma\cdot\boldsymbol{p})\phi_R=0。$$

维克定理 Wick's theorem 维克定理是微扰理论中的一个重要定理，它将算符的混合乘积表示成为正规乘积之和。其中正规乘积包含了所有可能的各种收缩，以便于计算在确定初、终态下的 S 矩阵元。

吴-杨结构 Wu-Yang construction 人们把磁单极子的纤维丛理论叫吴-杨结构。

杨-米尔斯场 Yang-Mills field 即**非阿贝尔规范场(non-Abelian guage fields)**。1954 年杨振宁和米尔斯首先将整体规范理论推广到局域的非阿贝尔群，并引入了相应的规范场。这就是 $SU(2)$场。现在已经很清楚，只要坚持规范原理，就必然导致规范场。相应于不同的规范群有不同的规范场。

坂田势 Yukawa potential 根据电磁相互作用是通过电磁场的量子-光子传递的事实，坂田揣测，核子之间的强相互作用也应是通过某种场的量子传递的。他并根据两种力的作用距离估算出这种量子的质量约为 200MeV。相应的势函数有下列形式：$V=\frac{g}{r}e^{-\eta r}$。其中 $\eta=ƛ^{-1}$是 π 介子的康普顿波长(=1.4×10^{-15}m)。一般叫坂田势。

Nuclear Physics
原子核物理学

原子核物理学　nuclear physics　简称核物理，是物理学的一门重要分支学科。它是研究原子核的结构、性质和变化规律的学科，也是在生产和国防上有着极其重要应用，并与其他学科有着广泛联系的学科。

它的研究内容主要包括原子核的基本性质、核衰变、核力、核结构、核反应、核裂变和核聚变等。研究核物理的实验手段极其精密和复杂，包含许多测量仪器和巨型加速器，这也成为核物理的重要内容。它的基础研究的重大成就以及核能和核科学技术的广泛应用，已成为科学现代化的重要标志之一。重离子核物理和高能核物理是核物理的两个重要前沿研究领域，前者为合成新元素开辟途径，后者与研究物质的下一层次联系起来，已发展成为粒子物理学。

一、原子核的基本性质
Basic Properties of Nuclei

原子核　atomic nucleus　原子中带正电的核，占有原子很小的体积，其直径为 10^{-14}米量级，约为原子直径的万分之一，但却占有原子质量的绝大部分。原子核所带电量等于原子中核外电子的总电量，但符号相反。原子核是由质子 p 和中子 n 组成。某一元素的原子核常用符号 ${}_{Z}^{A}X_{N}$(简记为 ${}_{Z}^{A}X$ 或 ${}^{A}X$)表示，其中 X 为该元素的化学符号，Z 为质子数，N 为中子数，$A=N+Z$ 为质量数。具有特定 Z、A 和核能态且其平均寿命长到足以被观察到的原子核称为核素。Z 相同但 A 不同的核素称为同位素，A 相同但 Z 不同的核素称为同量异位素，N 相同但 A 不同的核素称为同中子异位素，Z 和 N 均为偶数的核素称为偶-偶核，Z 和 N 均为奇数的核素称为奇-奇核，A 为奇数的核素称为奇 A 核。目前已知的 1900 多种原子核中，有 1600 多种是人工制造的，都具有放射性。

原子序数　atomic number　原子在元素周期表上的排列序号，它等于原子核内的质子数，即核电荷数，以符号 Z 表示。

核电荷数　nuclear charge number　即原子序数，见“原子序数”。

质量数　mass number　以原子质量单位表示元素的原子质量都接近一个整数，此整数称为该元素原子的质量数，通常以符号 A 表示。由于组成原子核的质子和中子的质量都非常接近一个原子质量单位，所以原子核的质量数 A 等于核内质子数 Z 和中子数 N 之和 $A=Z+N$。

原子质量单位　atomic mass unit　1960 年物理学国际会议决定，定义一个 ${}^{12}C$ 中性原子处于基态时静止质量的 1/12 为原子质量单位，记作 u，称为碳单位。根据定义，原子质量单位(u)与克(g)或千克(kg)之间的关系为

$$1u=1.6605655\times10^{-24}g$$
$$=1.6605655\times10^{-27}kg$$

历史上，曾定义 ${}^{16}O$ 原子质量的1/16为原子质量单位，记作 amu，又称为氧单位，它与碳单位的关系为

$$1u=1.000318amu$$

质子　proton　氢的最轻同位素的原子核，是所有原子核的组成部分之一，带正电荷 $e=1.6021892\times10^{-19}$ C，其静止质量 $m_p=1.6726485\times10^{-27}$ kg $=1.007276470$u，自旋为 1/2，磁矩 $\mu_p=+2.7928456\mu_N$，式中 $\mu_N=\frac{e\hbar}{2m_pc}$ 为核磁子，正号表示磁矩和自旋的方向相同。

中子　neutron　一种中性不带电的、自旋为 1/2 的粒子，是原子核组成成分之一，其静止质量

$$m_n=1.6749543\times10^{-27}kg$$
$$=1.008664904u。$$

它在自由状态下是不稳定的，通过 β 衰变转变成质子，其半衰期为 10.25 分，中子磁矩

$$\mu_n = -(1.913148 \pm 0.000066)\mu_N$$

式中 μ_N 为核磁子，负号表示磁矩和自旋反向。

核子 nucleon 质子和中子统称为核子，自旋为 1/2。原子核的核子数即为原子核的质量数。

核素 nuclide 见“原子核”。

偶-偶核 even-even nucleus 见“原子核”。

奇-奇核 odd-odd nucleus 见“原子核”。

奇 A 核 odd A nucleus 见“原子核”。

同位素 isotope 见“原子核”。

同位素丰度 isotopic abundance 在一种元素的同位素的混合物中，某种特定同位素的原子数与该混合物的总原子数之比，称为该特定同位素的丰度。如果某种特定同位素是天然存在的，则该同位素丰度称为天然丰度。例如碳有两种稳定的同位素 ^{12}C 和 ^{13}C，它们的天然丰度分别为 98.892% 和 1.108%。

同量异位素 isobar 见“原子核”。

同中子异位素 isotone 见“原子核”。

同核异能素 isomer 又称同质异能素，指质子数和中子数均相同，而处在不同能态的核素。表示同核异能素的方法通常是在质量数 A 后面加上 m，以表示这种核素的能态比较高。例如 ^{90m}Mo 是 ^{90}Mo 的同核异能素，前者的能态较高。同核异能素所处能态是一种激发态，其平均寿命长得足以被观察到。这种长寿命的激发态称为亚稳态。所以同核异能素是处于亚稳态的核素。

镜像核 mirror nuclei 如果将一个原子核中的所有质子换成中子，中子换成质子，就得到另一个原子核。这两个原子核彼此互为镜像核，如 ^3H 和 ^3He 互为镜像核。

超核 hypernucleus 一般原子核是由质子和中子组成，而超核是由质子、中子和超子组成。1952 年波兰物理家达尼茨和普尼夫斯基从暴露在宇宙线中的核乳胶里发现了第一个 Λ 超核。记为 $^A_\Lambda X$，其中 X 表示该元素的化学符号，A 为质子数、中子数和超子数之和。例如 $^3_\Lambda H$ 为 $pn\Lambda$ 形成的束缚态。超核的发现，打破了原子核仅是由质子和中子组成的传统观念，为原子核物理开辟了一个新的研究领域——超核物理。

Λ 超核 lambda hypernucleus 指含有 Λ 超子的原子核。人工产生 Λ 超核的方法是用加速器产生的 K^- 介子轰击靶核，并在核内产生奇异交换反应 $K^- + n \longrightarrow \Lambda + \pi^-$，$K^-$ 介子将奇异数交给一个核子而形成 Λ 超子，从而产生 Λ 超核。含有一个 Λ 超子的 Λ 超核称为单 Λ 超核。继发现单 Λ 超核后，又发现双 Λ 超核，如 $^6_{\Lambda\Lambda}He$ 是由两个质子、两个中子和两个 Λ 超子组成的双 Λ 超核。Λ 超核是不稳定的，其平均寿命为 10^{-10}s 左右。

Σ 超核 sigma hypernucleus 指含有 Σ 超子的原子核。20 世纪 80 年代初，欧洲核子研究中心（CERN）的一个小组在 ^{12}C 靶上作奇异交换反应 $K^- + {}^{12}C \longrightarrow {}^{12}_{\Sigma}C + \pi^-$ 或 $K^- + {}^{12}C \longrightarrow {}^{12}_{\Sigma}Be + \pi^+$，发现了 Σ 超核。

核半径 nuclear radius 表征原子核的大小，通常指从原子核中心到核物质密度尖锐下降区的距离，用 R 表示。R 是一个很小的量，约为 $10^{-15} \sim 10^{-14}$ m 数量级，无法直接测量，而是通过原子核与其他粒子相互作用而间接测量。实验资料表明，核半径 R 与原子核质量数 A 的 1/3 次方成正比，即 $R = r_0 A^{1/3}$，式中 r_0 为比例常数，用不同实验测得的 r_0 稍有差异，但数量级都是 10^{-15} 米。现代数据给出 r_0 大约在 $(1.1 \sim 1.5) \times 10^{-15}$ 米范围内。

如果认为原子核是球形的，则它的体积 $V = \frac{4}{3}\pi R^3 = \frac{4}{3}\pi r_0^3 A$，这表示核体积 V 与 A 成正比，由于 A 为核内的核子数，所以 $V \propto A$ 说明原子核中每个核子所占的体积为一常数。

核密度 nuclear density 原子核密度的简称，即核的单位体积内的质量。如果以 M_N 表示核的质量，V 表示核的体积，则核密度 ρ 为

$$\rho = M_N / V = M_N \Big/ \frac{4}{3}\pi r_0^3 A = \frac{3}{4\pi r_0^3 N}$$

式中 $N = A / M_N$，若 M_N 以克为单位，则可证明 N 的数值为阿伏伽德罗常数 N_A。由此可知，各种原子核的密度是相同的。将 r_0 和 N 的数值代入，得 $\rho \approx 10^{17} kg/m^3$。可见原子核是物质密集之处。

核自旋 nuclear spin 原子核的内禀角动量，是原子核的重要特性之一，它与整个原子核的外部运动无关。原子核的自旋角动量 $\boldsymbol{P}_J$ 的大小 P_J 是量子化的，$P_J=\hbar\sqrt{J(J+1)}$，式中 J 称为自旋量子数，J 为整数或半整数相应于质量数 A 为偶数或奇数。$\boldsymbol{P}_J$ 也是空间量子化的，它在空间某特殊方向的投影为 $P_{JZ}=M_J\hbar$，$M_J=J, J-1, \cdots, -J+1, -J$ 可见 J 是 $\boldsymbol{P}_J$ 在空间某特殊方向（Z 方向）投影的最大值（以 $\hbar$ 为单位）。所以，通常用这个投影的最大值 J 来表示核自旋的大小。例如，通常说质子（^{1}H 核）的自旋为 1/2，是指 $J=1/2$。

核磁矩 nuclear magnetic moment 与核自旋 $\boldsymbol{P}_J$ 相联系的磁矩，以 μ_J 表示。$\mu_J=g_J\left(\frac{e}{2m_pc}\right)\boldsymbol{P}_J$，式中 g_J 称为原子核的"g 因子"，μ_J 的大小为 $\mu_J=g_J\sqrt{J(J+1)}\mu_N$，式中 $\mu_N=\frac{e\hbar}{2m_pc}$ 称为核磁子。由于质子质量 m_p 为电子质量 m_e 的 1836.15 倍，所以核磁子 μ_N 为玻尔磁子 μ_B 的 1836.15 分之一。μ_J 在空间某特殊方向的投影为 $\mu_{JZ}=g_JM_J\mu_N$。通常测量 μ_J 在空间某特殊方向的投影的最大值 $\mu'_J=g_JJ\mu_N$，并以此来衡量核磁矩的大小。一般文献和书中列出的核磁矩大小是指 μ'_J（以 μ_N 为单位）。

核磁子 nuclear magneton 见"核磁矩"。

核电四极矩 nuclear electric quadrupole moment 表示原子核形状的物理量，核电四极矩的定义为 $Q=\frac{1}{e}\int_V\rho(3z^2-r^2)\mathrm{d}\tau$，式中 e 为元电荷，ρ 为核内点 $P(x,y,z)$ 周围体元 $\mathrm{d}\tau$ 中的电荷密度，r 为核的中心到点 P 的距离，积分限 V 为原子核体积。Q 具有面积量纲，常用 cm^2 或靶恩(b)作单位，$1\ \mathrm{b}=10^{-24}\mathrm{cm}^2$。

设核为旋转椭球体，其对称轴的半轴长度为 c，另二个半轴长度均为 a，$\rho=Ze/V$，则可证 $Q=\frac{2}{5}Z(c^2-a^2)$。如果原子核为球形，$c=a$，则 $Q=0$。令 ε 为原子核偏离球形的形变参量，定义 $\varepsilon=\Delta R/R$，其中 R 为与椭球等体积的球的半径，$\Delta R=c-R$，则可得 $Q=\frac{6}{5}ZR^2\varepsilon=\frac{6}{5}Zr_0^2A^{2/3}\varepsilon$。实验和计算表明，$\varepsilon$ 的绝对值是不等于零的小数，说明大多数原子核是非球形的，但偏离球形的形变不大。Q 有正有负，多数为正值，说明大多数原子核是长椭球形的。

超精细相互作用 hyperfine interaction 指核外电磁场与核矩的相互作用。核磁矩在外磁场中或核电四极矩在不均匀外电场中受到力偶的作用而使原子核的总角动量旋进并导致能级劈裂。测量跃迁能量或旋进频率可以获得原子核矩和外电磁场的信息。

核磁共振 nuclear magnetic resonance(NMR) 射频辐射被处于磁场中的物质吸收时所观察到的共振现象。原子核的磁矩（与核自旋平行或反平行）由于空间量子化在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中的附加能量 $\Delta E=-g_JM_J\mu_NB$，式中 $M_J=J, J-1, \cdots, -J+1, -J$。所以原子核在外磁场 $\boldsymbol{B}$ 中有 $2J+1$ 个核磁能级。如果此时在垂直于 $\boldsymbol{B}$ 的方向上再加一个强度较弱的高频交变磁场，则可能使这些核磁能级间发生跃迁。根据选择定则 $\Delta M_J=0, \pm1$，核磁能级的改变只能是 $\delta\Delta E=g_J\mu_NB$。故当交变磁场（射频辐射）的频率 ν 满足关系 $h\nu=g_J\mu_NB$ 时，射频辐射能量将被强烈吸收，称为共振吸收。这时，在探测器线圈中产生一个共振信号，这个信号对磁场 B 作图给出一个核磁共振谱。由于 $h\nu=g_J\mu_NB=\frac{\mu'_J}{J}B$，即 $\mu'_J=J\frac{h\nu}{B}$，测得 ν 和 B 就可确定核磁矩 μ'_J。核磁共振技术也可用于分子结构研究和医疗诊断。

同位旋 isospin 为了研究原子核和基本粒子而引入的一个特殊量子数。起初海森伯(Heisenberg)为了描述质子和中子之间的相互作用——核力的电荷无关性而引入的。由于质子和中子的质量及它们在原子核内的性质非常接近，可以认为它们是同一种粒子——核子的两个不同电荷状态，以不同的同位旋量子数相区别。与自旋类似，设想同位旋 I 在同位旋三维空间中特定方向的投影 I_3，由于空间量子化，I_3 可取 $2I+1$ 个值（$I, I-1, \cdots, -I+1, -I$），将不同的电荷态与不同的 I_3 态对应。由于核子有二个电荷态，所以 $I=1/2$，$I_3=$

$1/2, -1/2$,通常取 $I_3=1/2$ 对应于质子,$I_3=-1/2$ 对应于中子。后来同位旋这一概念推广到π介子等其他基本粒子,例如:π介子有三个电荷态 π^+, π^0 和 π^-, $I=1$, $I_3=1, 0, -1$分别相应于 π^+, π^0 和 π^-。

原子核的同位旋 nuclear isospin 原子核的同位旋是由核内所有核子的同位旋矢量耦合成的总同位旋。对于一个由 Z 个质子和 N 个中子组成的原子核,同位旋分量 $I_3=\frac{1}{2}(Z-N)$,同位旋量子数 $I \geqslant |I_3|$。通常认为这种原子核的基态为 I 最小的态,即 $I=\frac{1}{2}|Z-N|$ 的态。这样,一对镜像核,由于 $|Z-N|$ 相同,基态 I 也相同。例如 ^7Be、^7Li($I=1/2$);^{14}C、^{14}O($I=1$);^{23}Ne、^{23}Al($I=3/2$);^{20}Mg、^{20}O($I=2$)等。

核的同位旋多重态 isospin multiplet of nuclei 对于核子数 A、同位旋量子数 I 相同,其他量子数也相同只是 I_3 不同的态,称为同位旋多重态。例如,^{13}N 和 ^{13}C 的同位旋均为为 $I=1/2$, $I_3=1/2$ 的 ^{13}N 和 $I_3=-1/2$ 的 ^{13}C 组成一个同位旋二重态。核物理中同位旋多重态这一概念可以推广到粒子物理中去。

宇称 parity 宇称是描述微观粒子状态波函数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$在空间反射 $\boldsymbol{r} \longrightarrow -\boldsymbol{r}$ 变换下的特性。若波函数 ψ 是 $\boldsymbol{r}$ 的偶函数,则有 $\psi(-\boldsymbol{r}, t)=\psi(\boldsymbol{r}, t)$,这时称波函数 ψ 具有偶宇称或正宇称;若波函数 ψ 是 $\boldsymbol{r}$ 的奇函数,则有 $\psi(-\boldsymbol{r}, t)=-\psi(\boldsymbol{r}, t)$,这时称波函数 ψ 具有奇宇称或负宇称;若波函数 ψ 既不是 $\boldsymbol{r}$ 的偶函数又不是 $\boldsymbol{r}$ 的奇函数,则此波函数 ψ 没有确定的宇称。

对于在中心力场中运动的微观粒子,量子力学可以证明,其空间运动波函数的宇称 P 由粒子的轨道量子数 l 决定,$P=(-1)^l$,称为轨道宇称。

轨道宇称 orbital parity 见"宇称"。

内禀宇称 intrinsic parity 粒子的本征(内禀)波函数在空间反射下具有的变换性质定义为粒子的内禀宇称。由于不了解粒子本征波函数形式,只能通过实验,根据宇称守恒定律,加上某些人为规定,才能确定它们的内禀宇称。所以,内禀宇称只有相对的意义。通常规定质子、中子和 Λ 超子的内禀宇称为正,即 $\pi_p=\pi_n=\pi_\Lambda=+1$,由此可定出 $\pi_\pi=\pi_K=-1$。可以证明,光子的内禀宇称为负,正负费米子的内禀宇称相反,正反玻色子的内禀宇称相同、由于弱作用中宇称不守恒,只参与弱作用的中微子的内禀宇称是无法确定的。

原子核的宇称 nuclear parity 一般说,n 个粒子组成的体系,总的宇称是轨道宇称和内禀宇称的乘积。n 个粒子的内禀宇称为每个粒子内禀宇称 P_i 的乘积 $\prod_{i=1}^{n} Pi$, n 个粒子的轨道宇称 $P_{on}=\prod_{i=1}^{n}(-1)^{l_i}$,式中 l_i 为第 i 个粒子的轨道量子数,所以总的宇称为 $\pi=(\prod_{i=1}^{n} P_i) P_{on}$。对于原子核,核子的内禀宇称均为正,所以原子核的宇称仅由轨道宇称确定 $\pi=P_{on}$。通常核态的宇称是用加在自旋数值右上角的"+"或"-"号来表示。例如 ^{40}K 基态自旋 $J=4$,宇称为负,则表示为 4^-;^{12}C 基态自旋为零,宇称为正,则表示为 0^+。

原子核的统计性 nuclear statistics 统计性是波函数的一种特性。自旋为半整数的费米子服从费米-狄拉克统计,费米子体系的波函数对粒子坐标是反对称的。自旋为整数的玻色子服从爱因斯坦-玻色统计,玻色子体系的波函数对粒子坐标是对称的。原子核内的质子和中子的自旋均为1/2,属费米子。所以,一个体系中,当两个原子核对换时,相当于这两个核内的核子一一吩换,每两个核子对换一次,体系波函数改变一次符号。原子核共有 A 个核子,故两个原子核对换相当于核内核子一一对换,波函数变号 A 次,$(-1)^A$。所以,对奇 A 核,两原子核对换,波函数变号;对偶 A 核,两原子核对换,波函数不变号。因此,奇 A 核的自旋为半整数,波函数反对称,奇 A 核服从费米-狄拉克统计;偶 A 核的自旋为整数,波函数对称,偶 A 核服从爱因斯坦-玻色统计。

质量亏损 mass defect 原子核所含各核子分散存在时的总质量 $ZM(\mathrm{p})+NM(\mathrm{n})$与该原子核质量 $M(Z, A)$之差,为原子核的质量亏损

$\Delta M(Z,A)=ZM(\text{p})+NM(\text{n})-M(Z,A)$，式中 Z，A 分别表示原子核的质子数和质量数，$M(\text{p})$、$M(\text{n})$和 $M(Z,A)$分别表示质子、中子和该原子核的质量，其单位为原子质量单位 u。在计算质量亏损时，可以使用原子质量代替核质量，因为在相减过程中，相应的电子质量消去了。例如，对 ${}^4_2\text{He}$ 核，${}^1\text{H}$ 原子质量 $M_{\text{H}}=1.007825\text{u}$，中子质量 $M_{\text{n}}=1.008665\text{u}$，${}^4_2\text{He}$ 原子质量 $M_{\text{He}}=4.002603\text{u}$，代入得 $\Delta M=0.030377\text{u}$，说明两个质子和两个中子结合成 ${}^4_2\text{He}$ 时，质量减少了。根据质能关系 $\Delta E=\Delta Mc^2=28.30\text{MeV}$ 的能量被放出。这种在核子结合成原子核时放出的能量，称为结合能。反之，如果要把 ${}^4_2\text{He}$ 核分开为两个质子和两个中子，则必须给以 28.30MeV 的能量。

核结合能 nuclear binding energy 把原子核拆散成核子所需的能量，它等于由自由核子组成原子核时释放的能量。核素的结合能用 $B(Z,A)$表示，它与核素的质量亏损 $\Delta M(Z,A)$的关系为 $B(Z,A)=\Delta M(Z,A)\cdot c^2$。

根据液滴模型，并考虑对称能和对能，魏茨泽克(Weizsäcker)在 1935 年给出结合能的半经验公式

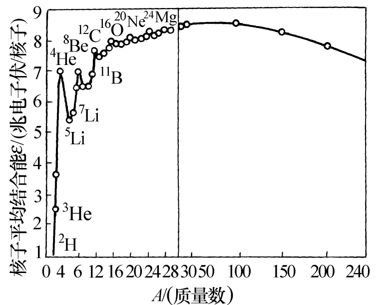
$$\begin{aligned}B(Z,A)&=B_V+B_s+B_c+B_a+B_p\\&=a_VA-a_sA^{2/3}-a_cZ^2A^{-1/3}\\&\quad-a_a\left(\frac{A}{2}-Z\right)^2A^{-1}\\&\quad+a_p\delta A^{-1/2}\end{aligned}$$

式中各项 B_V、B_s、B_c、B_a 和 B_p 分别称为体积能、表面能、库仑能、对称能和对能，Z，A 为原子核的电荷数和质量数。参数 a_i 和 δ 为

$$a_V=15.835\text{MeV},\ a_s=18.33\text{MeV},$$
$$a_c=0.714\text{MeV},\ a_a=92.80\text{MeV},$$
$$a_p=11.2\text{MeV}\quad \delta=\begin{cases}1, & \text{偶-偶核}\\0, & \text{奇}A\text{核}\\-1, & \text{奇-奇核}\end{cases}$$

整个公式的计算结果与实验数据的差别是很小的。

比结合能 specific binding energy 指原子核的每个核子的平均结合能 $\varepsilon=\dfrac{B(Z,A)}{A}$，以 MeVNu^{-1}为单位，它表征原子核的稳定程度，平均结合能愈大，核就愈稳定，因为要在这种核中分出一个核子需要较大的能量。将 ε 对 A 作图得比结合能曲线(见图)。由图看出，中等质量数($A=40\sim120$)的核，核子的平均结合能 ε 较大(8MeVNu^{-1}以上)；质量数较小的轻核和质量数较大的重核，核子的平均结合能 ε 较小，因而在轻核聚变和重核裂变时，都是由较小 ε 的核转变为较大 ε 的核，都要释放能量。



ε 与 A 的关系图

体积能 volume energy 原子核结合能公式中与体积成正比的部分 B_V。根据液滴模型，作为液滴的原子核具有体积 V，对于球形核，$V=\dfrac{4}{3}\pi r_0^3A$，A 为核子数。所以，结合能中与体积成正比的体积能 B_V 与 A 成正比，写作 $B_V=a_VA$，其中 a_V 为正的比例常数。体积能是核结合能中的主要项。

表面能 surface energy 原子核结合能公式中与表面核子数成正比的修正项 B_s。根据液滴模型，作为液滴的原子核有它的表面，在表面的核子只受到内部核子的作用，比核内核子所受的作用要小些。所以结合能中应考虑表面核子与内部核子的差异进行修正。因核半径 $R=r_0A^{1/3}$，核表面积与 R^2(即 $A^{2/3}$)成正比，所以表面能 $B_s=-a_sA^{2/3}$，其中 a_s 为正的比例常数，负号表示表面能与体积能的贡献彼此相反。

库仑能 Coulomb energy 原子核内质子间静电作用对原子核结合能的贡献 B_c。对球形核，如果质子在核内均匀分布，电荷密度 $\rho=$

$Ze\Big/\frac{4}{3}\pi R^3$，($r\leqslant R$)，则可得库仑能 $B_c=-\frac{3}{5}\frac{Z^2e^2}{r_0A^{1/3}}$，负号表示质子间的库仑作用是排斥的，它使原子核的结合能减小，写成 $B_c=-a_cZ^2A^{-1/3}$。

对称能 symmetry energy 实验表明，原子核内质子和中子有对称相处的趋势。稳定的轻核的质子数和中子数相等 $Z=N$。当 $Z\neq N$ 时，即质子和中子非对称相处时，结合能要降低，所以在结合能公式中应附加一项非对称能 B_a，习惯上也称为对称能。对称能和 N/Z 与 A 有关，当 $N=Z$ 即 $\frac{A}{2}=Z$ 时，对称能为零，是最大值。对于给定的原子核，对称能可写成 $B_a=-a_a\left(\frac{A}{2}-Z\right)^2A^{-1}$，式中 a_a 为正的常数，负号表示使结合能减少。

对能 pairing energy 在原子核的组成中，有质子和中子各自配对相处的趋势。同类核子配对相处时结合能增大，不配对时结合能要小些。所以结合能中应附加一项对能，又称奇偶能 $B_p=a_p\delta A^{-1/2}$，式中 a_p 为正的常数，

$$\delta=\begin{cases}1, & \text{偶-偶核}\\ 0, & \text{奇 } A \text{ 核}\\ -1, & \text{奇-奇核}\end{cases}$$

奇 A 核的对能为零作为对能的能量参考点。对能项的效应随核子数 A 的增大而减弱。

核能级 nuclear energy level 原子核所处的确定能量的状态。能量最低的状态称为基态，相应于最低能级；高于基态能量的状态称为激发态，相应于较高能级。处于激发态的原子核是不稳定的，一般要辐射出 γ 射线跃迁到基态，或者辐射出 α 射线（或 β 射线）转变为另一种核素的基态。

核力 nuclear force 核子间的短程强相互作用力，在距离大于约 0.5×10^{-15}米时主要表现为引力，能克服质子间库仑斥力而使各核子结合成原子核；但核力随距离增大而很快减小，当距离大于 2×10^{-15}米时就不再发生作用，因而核力为短程作用力；而当距离小于 0.4×10^{-15}米时引力又转变为强大的斥力而使核子不融合在一起。核力近似地具有电荷无关性，即当两核子处于相同的自旋和宇称态时，质子-中子、质子-质子和中子-中子的相互作用势是相同的。核力的主要形式为中心力 $V_c(r)$，其核势只与核子间距离 r 有关，还有非中心力（张量力）$V_T=V_T(r)\cdot\left[\frac{6(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r})^2}{r^2}-2\boldsymbol{S}^2\right]$ 和自旋-轨道耦合力 $V_{L,S}=V_{LS}(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$，式中 $\boldsymbol{L}$ 为两核子相对运动轨道角动量算符，$\boldsymbol{S}$ 为两核子的总自旋算符。由于两核子系统的单态自旋 $S=0$，所以后两种力只作用于自旋三重态（$S=1$）上。一般认为核力是由于核子间交换 π 介子而产生的。目前关于核力的详细性质还在研究中。

核力的电荷无关性 charge independence of nuclear force 见“核力”。

核势 nuclear potential 核子在另一核子或强子产生的势场中相应于其位置和量子态所具有的势能。核子-核子相互作用势 V 只与相对位置 $\boldsymbol{r}$，相对动量 $\boldsymbol{p}$ 以及两核子的自旋 $\boldsymbol{s}_1$、$\boldsymbol{s}_2$ 有关，其相互作用势可表示为 $V=V(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2)$。

中心力 central force 见“核力”。

非中心力 non-central force 见“核力”。

自旋-轨道耦合力 spin-orbit coupling force 见“核力”。

库仑势垒 Coulomb barrier 两个原子核之间的库仑作用势 $V_{CB}=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}$，式中 Z_1、Z_2 分别为两原子核的电荷数，r 为两原子核之间的距离，势能曲线在一个核的周围高高突起，像个壁垒，称为库仑势垒。当 $r=R_1+R_2$（R_1、R_2 为两原子核的半径）时，势垒最高，$V_{CB}=\frac{Z_1Z_2e^2}{R_1+R_2}$称为库仑势垒高度。由于库仑势场的排斥作用，库仑势垒将阻止碰撞的原子核之间的相互穿透。当两原子核相对运动动能 E 小于 V_{CB}时，穿透势垒引起核反应的概率很小，主要发生弹性碰撞。只有当 E 接近 V_{CB}时，反应概率随 E 增加而增大。对于复合核，系统的激发能不高时，由于受到库仑势垒的阻挡，发射带电粒子比发射中子的概率小。

二、原子核结构
Nuclear Structure

核结构 nuclear structure 原子核的组成、基本属性和运动形态的统称。原子核结构是原子核物理学的一个中心问题，它是物质结构的一个重要层次。目前，由于核力的性质尚不清楚及量子力学多体问题解决之困难，原子核结构的理论还不够成熟，大部分是半唯象的模型理论。

核模型 nuclear model 核模型是核物理中对一定条件下原子核的某些性质作概括描述的手段，它以一定的实验事实为基础，都有一定的适用界限，而且随着科学实践的发展而发展。主要的核模型有：费米气体模型、液滴模型、壳层模型、集体运动模型和相互作用玻色子模型等。

费米气体模型 Fermi gas model 把原子核视同一团气体，视同气体分子的核子（费米子）在半径为 R 的核内彼此无相互作用地自由运动，因而可视为在无限深势阱中运动的模型。由此计算核能级并给出激发态的一些有用信息。费米气体模型的成功之处，是揭示了原子核中核子在一定条件下近乎独立的行为，在它的基础上今已发展成为壳层模型。

液滴模型 liquid drop model 将原子核视作一个不可压缩的带电液滴、核内核子视作为液滴中的分子的一种模型。它的实验依据是：原子核结合能几乎与核子数 A 成正比，说明核力具有饱和性，这类似于分子力的饱和性；原子核体积 V 与 A 成正比，因而核密度几乎是常数，类似于液体的不可压缩性。利用液滴模型加上少量经验参数能成功地拟合原子核的质量和基态结合能，用液滴模型可近似地解释原子核裂变和某些核反应现象。液滴模型的突出优点是图像清晰，物理意义明确，简便适用。但在描述核内核子独立运动行为存在很大局限性。

幻数 magic number 相应于特别稳定原子核的质子数和中子数。实验表明，2、8、20、28、50、82、126 为幻数。幻数的存在，表明基态原子核存在壳层结构。核内质子数或中子数为幻数时，该核的壳层填满，形成闭合壳层。质子数或中子数为幻数的原子核称为幻核，质子数和中子数均为幻数的核称为双幻核。幻核要比邻近的原子核稳定得多。

平均场 mean field 原子核中每个核子受其他$(A-1)$个核子作用的平均势场，用 $V(\boldsymbol{r})$表示，其中 $\boldsymbol{r}$ 是核子相对于核中心的坐标。对球形核，$V(\boldsymbol{r})$近似为球对称的。一般认为比较合理的平均核场为伍兹-萨克森势阱 $V(r)=-V_0/[1+e^{(r-R)/a}]$，$(V_0>0)$，式中 a 为常数，R 为力程，V_0 为中心强度，负号表示吸引势。理论计算表明，不同势阱选择对推导的能级次序影响极少，常采用直角势阱或谐振子势阱计算。

壳层模型 shell model 又称独立粒子模型，即原子核中每个核子近似地视作是在一个含强自旋-轨道耦合作用势的平均场中按泡利原理独立运动的模型。原子核存在壳层结构表明，每个核子在其他$(A-1)$个核子作用产生的平均场中运动。如由中心势场算出的核子能级来解释壳层结构不符合实验所给出的幻数。为了使理论与实验完全一致，1949 年迈耶和琼森提出在平均场中还包含强自旋-轨道耦合势，应取为原子核中单核子运动哈密顿量

$$H=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V(r)+V_{so}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l})$$

式中 $V(r)$为中心势场，第三项为自旋-轨道耦合作用势。这样就使得轨道角动量 l 相应的能级分裂为 $l\pm1/2$的两能级，核子角动量 $j=l+1/2$ 的能级比 $j=l-1/2$ 的能级低，而且随 l 的增大，能级的分裂也愈大，从而完全解释了实验所给出的幻数。迈耶（Mayer）和琼森（Jensen）为此荣获 1963 年诺贝尔物理学奖。

单粒子能级 single-particle energy level 即单核子能级。单个核子在包括自旋-轨道耦合作用的平均场中运动的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V(r)+V_{so}(\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l})\right]\psi=E\psi$$

求解而得到的单核子能级序列。球对称场的单粒子能级用量子数 n、l、j 标记，n 为径向量

子数，$n=1,2,3,\cdots$；l 为轨道角动量量子数，$l=0,1,2,3\cdots$分别用符号 s、p、d、f、g、h、i、…表示；$j=l\pm1/2$ 为总角动量量子数，相同 n、l 时，$j=l+1/2$ 的能级比 $j=l-1/2$ 的能级低。于是，单粒子能级用 nX_j 标记，其中 X 为 l 值相应的符号。所以，求得的单粒子能级可依次表示为 $1s_{1/2}$，$1p_{3/2}$，$1p_{1/2}$，$1d_{5/2}$，$2s_{1/2}$，$1d_{3/2}$，$1f_{7/2}$，$2p_{3/2}$，$1f_{5/2}$，$2p_{1/2}$，$1g_{9/2}$，$1g_{7/2}$，$2d_{5/2}$，$2d_{3/2}$，$3s_{1/2}$，$1h_{11/2}$，$1h_{9/2}$，$2f_{7/2}$，$2f_{5/2}$，$3p_{3/2}$，$3p_{1/2}$，$1i_{13/2}$，$2g_{9/2}$，$3d_{5/2}$，$1i_{11/2}$，$2g_{7/2}$，$4s_{1/2}$，$3d_{3/2}$，…。在核的单粒子能级中，不同能级 nX_j 有不同的能量，核内核子从低壳能级往高壳层能级填充，根据泡利原理，每个能级的简并度为 $2j+1$，即每个能级可容纳 $2j+1$ 个同类核子。于是，$1s_{1/2}$，$1p_{1/2}$，$1d_{3/2}$，$1f_{7/2}$，$1g_{9/2}$，$1h_{11/2}$，$1i_{13/2}$相应的能级填满的核子数，即为幻数 2，8，20，28，50，82，126。两幻数间的各能级形成一个主壳层，主壳层内每一能级称为支壳层。由于质子间受库仑斥力作用，质子能级比相应的中子能级略高，但能级次序不变。

原子核基态的自旋 nuclear spin of ground state 原子核处于最低能态时的角动量，这可由壳层模型给出。对于偶-偶核，由于同一能级的偶数个同类核子以自旋相反的形式相处，所以偶-偶核的基态自旋为零，对于奇 A 核，它的基态自旋由最后未成对的单核子的角动量 j_p（或 j_n）决定，对于奇-奇核，它的基态自旋由诺德哈姆规则确定，其规则为：(1)若最后两个奇核子的自旋和轨道角动量平行 $j_p=l_p+\dfrac{1}{2}$，$j_n=l_n+\dfrac{1}{2}$或反平行 $j_p=l_p-\dfrac{1}{2}$，$j_n=l_n-\dfrac{1}{2}$，则奇-奇核的基态自旋多数情况为 $J=j_p+j_n$，也有一些例外，如 $^{58}_{27}Co$ 的基态自旋不是 5，而是 2；(2)若最后两个奇核子中，一个核子的自旋与轨道角动量平行，另一反平行，即 $j_p=l_p+\dfrac{1}{2}$，$j_n=l_n-\dfrac{1}{2}$或 $j_p=l_p-\dfrac{1}{2}$，$j_n=l_n+\dfrac{1}{2}$，则奇-奇核的基态自旋 $J=|j_p-j_n|$，也稍有例外，如 $^{40}_{19}K$ 的基态自旋不是 2，而是 4。

诺德哈姆规则 Nordheim rule 见“原子核基态的自旋”。

施密特线 Schmidt lines 施密特(Schmidt)给出奇 A 核的磁矩随核自旋的变化曲线，施密特假定奇 A 核的磁矩 μ 由单个奇核子的自旋 j 决定。根据壳层模型，若奇核子的轨道角动量为 l，则奇质子核的磁矩 μ（以核磁子 μ_N 为单位）为

$$\mu=\begin{cases} j+2.29, & j=l+\dfrac{1}{2} \\ j-\dfrac{2.29}{j+1}j, & j=l-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

奇中子核的磁矩 μ 为

$$\mu=\begin{cases} -1.91, & j=l+\dfrac{1}{2} \\ 1.91+\dfrac{j}{j+1}, & j=l-\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

实际上，大部分实验点并没有落在由上述两式确定的四条曲线上，而是落在各自的两条施密特线之间。由此可见，单粒子壳层模型预言的奇 A 核磁矩 μ 接近于实验值的变化趋势。

变形核 deformed nucleus 非球对称的原子核。满壳核是球对称的。若未满壳层有多个核子，由于它们之间作用力长程部分产生的极化效应，使原子核发生形变。形变核的区域大致在质量数 $A\approx24$，$150<A<190$ 及 $A>220$ 的区域，假定核物质不可压缩，在形变中保持体积不变，则变形核的表面 $R(\theta,\varphi)$在球坐标中的表式为

$$R(\theta,\varphi)=R_0\left[1+\sum_{\lambda\mu}\alpha_{\lambda\mu}Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\right]$$

式中 R_0 近似为同体积球形核的半径，$\alpha_{\lambda\mu}$为 2^λ 极形变振幅。$\lambda=2$ 为四极形变，$\lambda=3$ 为八极形变，…。$\lambda=1$ 相应于质心移动，形状并不改变。最重要的是四极形变。原子核的形变一般具有轴对称性，类似于一个椭球（长椭球或扁椭球），另一类为非轴对称形变。

集体运动 collective motion 原子核的整体运动形态。核的集体运动有转动和振动。变形核在空间的方向随时间和表面形状的变化导致核的转动和振动。对远离满壳的原子核（质量数 $A\approx24$，$150<A<190$ 及 $A>220$），其激发能级的能量 E_J 与其自旋 J 的关系 $E_J=\dfrac{\hbar^2}{2\vartheta}$

$\cdot J(J+1)$，式中 ϑ 为转动惯量，为转动能谱。对满壳附近的原子核（$60<A<150$，$190<A<220$），其激发能级间距近似相等，为振动能谱。

核转动能级 nuclear rotational energy level 在形变核的低激发能谱中，相对能量 E_J 与其自旋 J 近似满足关系 $E_J \propto J(J+1)$ 的一些能级。满足上述关系的转动能级属于同一内禀态 K^π，K 为核自旋在形变核（椭球）对称轴上的投影量子数，π 为核的宇称。其自旋 J 的取值为 $J=K, K+1, K+2, \cdots$ 或 $J=K, K+2, K+4, \cdots$，这样一组能级构成一个转动带。对于偶-偶核，其基态转动带 $K=0$，自旋宇称为 $0^+, 2^+, 4^+, \cdots$，各能级能量 $E_J=\frac{\hbar^2}{2\vartheta}J(J+1)$，式中 ϑ 为转动惯量。对于奇 A 核，有一个不配对的核子，对每一个单粒子能级，相应于一个转动带，其自旋 $J=K, K+1, K+2, \cdots$ 且有相同的宇称，转动能谱为

$$E_{KJ}=\text{常数}+\frac{\hbar^2}{2\vartheta}\left[J(J+1)+a(-1)^{J+1/2}(J+1/2)\delta_{K1/2}\right]$$

式中 a 脱耦合常数，可用内禀态波函数计算。对奇-奇核，低激发能谱的能级很密，也与转动带结构相符。

核振动能级 nuclear vibrational energy level 在核的低激发能谱中，能级间距近似相等的一组能级。当满壳外核子数不多时，原子核的稳定形变不能发生，核的表面形状发生振动。这种原子核主要发生在 $60<A<150$，$190<A<220$ 的过渡区中。原子核的平衡形状仍然是球形。主要运动形式是在球形附近作四极振动。理论给出，偶-偶核的振动能量为

$$E=(N+5/2)\hbar\omega,\ N=0,1,2,3,\cdots$$

式中 N 为声子数，每个声子角动量为 2。基态（$N=0$）自旋宇称为 0^+，第一激态（$N=1$）为 2^+，第二激态（$N=2$）可能为 0^+、2^+、4^+。第三激态（$N=3$）可能为 $0^+, 2^+, 3^+, 4^+$ 和 6^+。对奇 A 核的振动，研究得还不够。

综合模型 unified model 描述单粒子运动和集体运动同时存在，以及由它们的相互作用而发生的各种核现象的模型。该模型是玻尔和莫特尔森于 1952～1953 年提出的，又称玻尔-莫特尔森模型。对于一个具有轴对称形变的原子核，核的内部运动用内禀哈密顿量 H_{int} 描述，近似地认为核子在形变场中运动，核的内禀波函数 χ_K 为形变壳模型波函数，K 为核自旋 J 在核对称轴上的投影。核的转动用转动哈密顿量 H_{rot} 描写，转动波函数为 D^{J*}_{MK}，M 为 J 在空间固定方向上的投影，用 H' 描写内部运动和转动的耦合哈密顿量。于是系统的总哈密顿量为

$$H=H_{\text{int}}+H_{\text{rot}}+H'$$

若略去 H'，则原子核波函数 $\psi^J_{MK}\approx D^{J*}_{MK}\chi_K$。对同一转动带，$\chi_K$ 相同，转动能级的能量 $E_J\propto J(J+1)$。该模型还考虑核表面振动，球形核表面的微振动用简谐振动描写，对四极振动，有五个自由度，求得振动能谱的能量为 $E_N=(N+5/2)\hbar\omega$，$N=0,1,2,\cdots$ 为声子数。由于每个声子的角动量为 2，所以基态（$N=0$）自旋宇称为 0^+，第一激态（$N=1$）的自旋宇称为 2^+，第二激态（$N=2$）的自旋宇称为 $0^+, 2^+, 4^+$。该模型成功地描述形变核和球形振动核的低激发态性质，玻尔（Bohr）和莫特尔森（Mottelson）为此荣获 1975 年诺贝尔物理学奖（与雷恩瓦特（Rainwater）共享）。

相互作用玻色子模型 interacting boson model（IBM） 1975 年，有马（Arima）等人提出了相互作用玻色子模型，简记为 IBM。该模型将核内的核子对近似地处理为玻色子，并用相互作用的玻色子描述原子核的各种集体运动状态。IBM 将偶-偶核分成满壳核心部分和满壳外价核子，而价核子都结合成角动量 $J=0$ 或 $J=2$ 的核子对，并近似地当作 $s(J=0)$ 玻色子和 $d(J=2)$ 玻色子，玻色子之间有相互作用，用以描写偶-偶核的集体运动能级结构。20 世纪 80 年代初，人们还推广价核子对的角动量也可能为 4，相应于 $J=4$ 的玻色子称为 g 玻色子。用 sdgIBM 描述实验时也取得相当成功。此后，IBM 又推广到奇 A 核。IBM 在核能谱分析中可以和综合模型相互补充，但两者物理内涵有很大差别。

高自旋态 high-spin state 通常指核自旋 J 大于 10 的核态。原子核高自旋态的激发主要

来自重离子反应及重离子库仑激发。1977年已定出 $J=32$ 的能级(^{158}Er),1980年定出 $J=40$(^{152}Dy)和 $J=85/2$(^{147}Gd)的能级,1986年又定出 $J=60$(^{156}Dy)的能级。高自旋态是近年来核物理中比较活跃的研究领域。首先研究晕谱的规律,晕态是指在给定 J 下能量最低的状态。对于偶-偶核,晕态能量($J<10$)可用下式给出

$$E(J)=AJ(J+1)+BJ^2(J+1)^2,\quad (B<0)$$

其中第一项为纯转动能,$A=\hbar^2/2\vartheta$,第二项为振动修正,它反映转动惯量 ϑ 是 J 的函数,且 ϑ 随 J 增大而增大。进一步研究发现,ϑ 随转动角频率 ω 的变化出现回弯现象。

回弯 backbending 指核的转动惯量 ϑ 随转动角频率 ω 变化的奇异现象。对于 J 较低的能级,ϑ 与 ω 之间满足 $\vartheta\propto\omega^2$ 关系,若以 $2\vartheta/\hbar^2$ 为纵坐标,$\hbar^2\omega^2$ 为横坐标作图,则可看到,当 $J\leqslant10$ 时,ϑ 随 ω^2 线性增加;当 $J\geqslant12$ 时,ϑ 急剧上升而出现回弯,曲线呈现 S 形。回弯现象在形变核的晕态中普遍存在。形变核的回弯是由于带交叉引起的,即沿着晕谱往上走,就会出现从一个转动带跳到另一个转动带,使 $\vartheta-\omega^2$ 曲线出现回弯。

三、原子核衰变
Nuclear Decay

放射性 radioactivity 某些核素自发地放射出各种射线的现象。有的核素发射 α 射线,有的发射 β 射线,有的发射 α 或 β 射线的同时也发射 γ 射线,有的发射三种射线。还有发射正电子、质子、中子和其他粒子的。能自发地放射各种射线的核素称为放射性核素,也叫不稳定核素。自然界存在的核素的放射性称为天然放射性,由辐照感应而产生的放射性称为感应放射性或人工放射性。实验表明,对放射性核素的加温、加压或加磁场,都不能改变射线的发射。这表明放射性现象是由原子核内部性质的变化引起的。

放射性衰变 radioactive decay 一种核素自发地放射出射线,转变为另一种核素的现象。放出 α 射线的核衰变称为 α 衰变,放出 β 射线的核衰变称为 β 衰变。放出 γ 射线既与 γ 跃迁相联系,也与 α 衰变或 β 衰变相联系。实验表明,任何放射性核素在单独存在时都服从指数衰减规律,$N=N_0e^{-\lambda t}$,式中 N_0 和 N 分别是 $t=0$ 时刻和 t 时刻放射性核素的量,λ 为衰变常数,它具有时间倒数的量纲,其大小决定衰变的快慢。

母核 parent nucleus 指放射性衰变前的不稳定(放射性)核素。母核衰变后的剩余核称为子核。例如 $^{210}_{84}Po$ 的 α 衰变 $^{210}_{84}Po\longrightarrow^{206}_{82}Pb$,这一过程中 $^{210}_{84}Po$ 为母核,$^{206}_{82}Pb$ 为子核。又如 $^{32}_{15}P$ 的 β 衰变 $^{32}_{15}P\longrightarrow^{32}_{16}S+e^-+\bar{\nu}$ 过程中 $^{32}_{15}P$ 为母核,$^{32}_{16}S$ 为子核。

子核 daughter nucleus 见“母核”。

衰变定律 decay law 指放射性指数衰减规律,见“放射性衰变”。

衰变概率 decay probability 指每个放射性原子核衰变的概率。由指数衰减规律得

$$-\mathrm{d}N=\lambda N\mathrm{d}t$$

$-\mathrm{d}N$ 表示在 t 到 $t+\mathrm{d}t$ 时间内 N 个放射性核素发生的衰变数,于是 $\frac{-\mathrm{d}N}{N}=\lambda\mathrm{d}t$ 为衰变概率。

衰变常数 decay constant 放射性核衰变快慢的标志,用 λ 表示。由指数衰减规律得 $\lambda=\left(-\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t}\right)\Big/N$,它表示单位时间内的衰变概率,即衰变速率。它表明在同数目 N 的两种放射性核素的样品中,衰变常数 λ 大的,单位时间内的衰变概率大,核衰变速率也大,该样品的放射性强。λ 是每个放射性核素特有的常数,因此测定衰变常数 λ 是识别放射性核素的一个重要方法。

半衰期 half-life period 在单一的放射性衰变过程中,放射性原子核衰减到原来数目的一半所需的时间,以 $T_{1/2}$ 表示。由指数衰减规律,$t=T_{1/2}$ 时 $N=\frac{N_0}{2}$,可得 $T_{1/2}=\frac{\ln2}{\lambda}=\frac{0.693}{\lambda}$。各种放射性核素的半衰期可以差别很

大，有的可长达几十亿年，有的短至千万分之一秒。半衰期 $T_{1/2}$长的放射性核较稳定。

平均寿命 mean life 指放射性核素的平均存活时间，以 τ 表示。根据放射性指数衰减规律，$N=N_0e^{-\lambda t}$为 t 时刻的放射性核素，而 $-dN=\lambda N dt$ 为 t 到 $t+dt$ 的无穷小时间 dt 内发生衰变的核素，因而可以认为 $-dN$的寿命为 t，总寿命$(-dN)t=t\lambda N dt$，平均寿命

$$\tau=\frac{1}{N_0}\int_0^{\infty}t\lambda N dt=\frac{1}{\lambda}$$

于是得半衰期 $T_{1/2}$、平均寿命 τ 和衰变常数 λ 的关系为 $T_{1/2}=0.693\tau=\frac{0.693}{\lambda}$。

放射性活度 activity 又称放射性强度，它表示一定量的放射性核素在一个很短的时间间隔 dt 内发生的核衰变数 $-dN$ 除以 dt 所得的商，即衰变率，以 A 表示。$A=-\frac{dN}{dt}=\lambda N=A_0e^{-\lambda t}$，式中 λ 为衰变常数，A_0 为 $t=0$时刻的放射性活度。上式表明，放射性活度和放射性核素具有相同的指数衰减规律。

级联衰变 cascade decay 原子核衰变往往是一代又一代地连续进行，直到最后达到稳定为止，这种衰变称为级联衰变，又称连续衰变。考虑母体 A 衰变为子体 B，而子体 B 又衰变为第二代子体 C，即 $A\rightarrow B\rightarrow C$ 可以证明

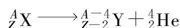
$$N_B(t)=\frac{\lambda_A}{\lambda_B-\lambda_A}N_A(0)[e^{-\lambda_A t}-e^{-\lambda_B t}]$$
$$=\frac{\lambda_A}{\lambda_B-\lambda_A}N_A(t)[1-e^{-(\lambda_B-\lambda_A)t}]$$

式中 λ_A 和 λ_B 以及 $N_A(t)$和 $N_B(t)$分别为核素 A 和核素 B 的衰变常数及在 t 时刻核素的数目。如果 $\lambda_A\ll\lambda_B$，即 $T_{1/2A}\gg T_{1/2B}$，则在足长的时间后有 $\lambda_B N_B(t)=\lambda_A N_A(t)$。这表明核素 A 和 B 的放射性活度（衰变率）相等。由于核素 A 的衰变率即为核素 B 的生长率以及 $T_{1/2A}$ 很长，所以在观察时间内看不出母体 A 的变化，而子体 B 的生长率等于其衰变率。这样，母体 A 和子体 B 达到了放射性平衡。

放射性平衡 radioactive balance 见“级联衰变”。

位移定则 displacement law 实验表明，放射性衰变过程遵守电荷数和质量数守恒定律。由此可确定位移定则，即子核相对于母核在周期表上的移动规则。

对于 α 衰变，由于 α 粒子是电荷数为+2、质量数为 4 的氦原子核，所以由放射性核素 ${}^A_Z X$ 经 α 衰变形成的子核 ${}^{A-4}_{Z-2}Y$，其电荷数较母核减少 2，即在周期表上移前二位，用方程式表示为



$${}^A_Z X\longrightarrow{}^{A-4}_{Z-2}Y+{}^4_2He$$

对于 β 衰变，由于 β 粒子是电荷数为−1、质量数为 0 的电子 ${}^0_{-1}e$，所以放射性核素 ${}^A_Z X$经 β 衰变形成的子核 ${}^A_{Z+1}Y$，其电荷数较母核增加了 1，即在周期表上移后一位，用方程式表示为



$${}^A_Z X\longrightarrow{}^A_{Z+1}Y+{}^0_{-1}e+\bar{\nu}$$

放射系 radioactive series 级联衰变系列通称为放射系，有三个天然放射系，即钍系、铀系和锕系。它们的母体半衰期都很长，和地球年龄（$\approx10^9$y）相近或更长。它们的成员大多具有 α 放射性，少数具有 β^- 放射性，一般都伴有 γ 辐射。

（1）钍系　从 ${}^{232}Th$ 开始，经 10 次级联衰变，最后到稳定核素 ${}^{208}Pb$。其质量数都是 4 的整数倍，$A=4n$，又称 $4n$ 系，母体的半衰期为 1.41×10^{10}y。

（2）铀系　从 ${}^{238}U$ 开始，经 14 次级联衰变，最后到稳定核素 ${}^{206}Pb$，其质量数都是 $A=4n+2$，又称 $4n+2$ 系，母体 ${}^{238}U$ 的半衰期为 4.468×10^9y。

（3）锕系　从 ${}^{235}U$ 开始，经 11 次级联衰变，最后到稳定核素 ${}^{207}Pb$，其质量数都是 $A=4n+3$，又称 $4n+3$ 系，因 ${}^{235}U$ 俗称锕铀，故称锕系。母体 ${}^{235}U$ 的半衰期为 7.038×10^8y。

（4）镎系　$A=4n+1$，又称 $4n+1$ 系，该系是由人工合成的，该放射系中核素镎 ${}^{237}Np$ 的半衰期（2.14×10^6y）最长，故称镎系，最后到稳定核素 ${}^{209}Bi$。

比放射性活度 specific activity 又称比活度，它表示单位质量放射源的放射性活度，比放射性活度不仅表明放射源的放射性活度，而且表明放射源物质的纯度高低。实际上，某种核素的放射源不大可能全部由该种核素组成，还含有其他杂质。其他杂质的相对含量高（低）的放射源，其纯度低（高），则比放射性活

度低(高)。

贝可勒尔(单位) becquerel(unit) 放射性活度的单位,符号为 Bq,以纪念天然放射性现象的发现者贝可勒尔。1975 年国际计量大会规定,放射性活度的国际单位制的“贝可勒尔”为每秒一次衰变,即 $1Bq=1s^{-1}$,比放射性活度的单位为 Bq/g。

卢瑟福(单位) rutherford(unit) 放射性活度的单位,符号为 Rd,以纪念钍的发现者、第一个实现人工核转变的卢瑟福。一定量的放射性物质若每秒有 10^6 个核衰变,其放射性活度定义为 1 卢瑟福,即 $1Rd=10^6Bq$。

居里(单位) curie(unit) 放射性活度的单位,符号为 Ci,以纪念镭和钋的发现者居里夫人,原先定义:1Ci 的氡等于和 1 克镭处于平衡的氡的每秒衰变数,亦即 1 克镭的每秒衰变数,早期测得的每秒衰变数为 3.7×10^{10} 次。由于这种定义使用不便,1950 年后规定:1Ci 的放射源每次产生 3.7×10^{10} 次衰变,即

$$1\ \text{Ci}=3.7\times10^{10}\ \text{s}^{-1}$$
$$1\ \text{mCi}=3.7\times10^{7}\ \text{s}^{-1}$$
$$1\ \mu\text{Ci}=3.7\times10^{4}\ \text{s}^{-1}$$

它与另外二种放射性活度单位的关系为

$$1\ \text{Ci}=3.7\times10^{10}\ \text{Bq}=3.7\times10^{4}\ \text{Rd}。$$

射线强度 ray strength 放射性核素在单位时间内放出某种粒子的数目,它是与放射性活度有区别的一个物理量。如果某放射性核素的一次衰变只放出一个粒子,如 ^{210}Po 的一次衰变只放出一个 α 粒子,则该核素的 α 射线强度与其放射性活度相等。对于大多数放射性核素,一次衰变往往放出若干个粒子,例如 ^{60}Co 的一次衰变放出两个 γ 光子,所以 ^{60}Co 的 γ 射线强度为其放射性活度的两倍。

α 衰变 alpha decay 原子核自发地放射出 α 粒子而发生的核衰变。由于 α 粒子是电荷数为+2 质量数为 4 的氦核,所以 α 衰变中子核比母核的电荷数减少 2,质量数减少 4,它可表示为 ${}^{A}_{Z}X \longrightarrow {}^{A-4}_{Z-2}Y+{}^{4}_{2}He$,式中 X 表示母核,Y 为子核。α 衰变的半衰期随核素不同变化很大,长者可达 10^{15} 年,短者可小于 10^{-7} 秒。

α 衰变能 alpha decay energy α 衰变时放出的能量 $E_d(\alpha)$,它等于 α 粒子的动能 E_α 和子核动能 E_Y 之和,$E_d(\alpha)=E_\alpha+E_Y$。根据相对论质能关系,$E_d(\alpha)=[m_X-(m_Y+m_\alpha)]c^2$,式中 m_X、m_Y、m_α 分别为母核、子核和 α 粒子的质量,也可分别换成 X、Y 和氦的原子质量 M_X、M_Y 和 M_{He} 来计算 α 衰变能 $E_d(\alpha)=[M_X-(M_Y+M_{He})]c^2$。由于发生 α 衰变的必要条件为 $E_d(\alpha)>0$,即 $M_X>M_Y+M_{He}$,这表明一个核要发生 α 衰变,则母核的原子质量必须大于子核原子和氦原子质量之和。由于子核的动能 $E_Y>0$,根据动量守恒和能量守恒可近似地给出 $E_\alpha=\frac{A-4}{A}E_d$, $E_Y=\frac{4}{A}E_d$。

短射程 α 粒子 short-range alpha particle 原子核从母核基态衰变到子核激发态时所放出的 α 粒子。设母核基态衰变到子核基态放出 α 粒子的能量为 E_{α_0},母核基态衰变到子核第一激态、第二激态……放出的 α 粒子的能量分别为 E_{α_1}, E_{α_2},…则有 $E_{\alpha_0}>E_{\alpha_1}>E_{\alpha_2}>\cdots$。由 α 粒子动能可求得相应的衰变能 $E_d(\alpha_0)$, $E_d(\alpha_1)$, $E_d(\alpha_2)$,…根据能量守恒,有

$$E_d(\alpha_0)=E_d(\alpha_1)+E_1^*$$
$$=E_d(\alpha_2)+E_2^*$$

式中 E_1^*, E_2^*,…分别为子核的第一、第二激发能级的能量。由此可确定各激发能级的能量为 $E_1^*=E_d(\alpha_0)-E_d(\alpha_1)$, $E_2^*=E_d(\alpha_0)-E_d(\alpha_2)$,这对研究原子核结构有重要意义。

长射程 α 粒子 long-range alpha particle 原子核从母核激发态衰变到子核基态时所放出的 α 粒子。这种过程只发生于少数几种原子核中。当母核本身是一个衰变产物时,它既可以处于基态,也可处于激发态。处于激发态的母核发射 γ 射线要比发射 α 粒子的概率大几个数量级。因此长射程 α 粒子的强度极低,只有总强度的 10^{-4} 到 10^{-7}。在天然放射性核素中,只观察到两种原子核 ^{212}Po 和 ^{214}Po 发射长射程 α 粒子。测量母核激发态和基态衰变到子核基态放出的 α 粒子的能量,便可确定母核所处激发态的能量。

盖革-努塔尔关系 Geiger-Nuttall relation 由盖革和努塔尔根据实验数据总结出天然放射系 α 衰变中衰变常数 λ 和 α 粒子在空气中的

射程 R 之间的关系，其形式为

$$\lambda = aR^{57.5}$$

式中 a 对同一天然放射系为一常数。由于射程 R 和 α 粒子动能 E_α 的经验关系 $R \propto E_\alpha^{3/2}$，于是得

$$\ln\lambda = A + 86.25\ln E_\alpha$$

式中 A 为常数。虽然此式有很大近似性，但它揭示了衰变常数 λ 随 α 粒子动能 E_α 的变化趋势。

质子衰变 proton decay 原子核自发地放射出质子而发生的核转变。对普通的核素，最后一个质子的结合能总是正的，即对放射质子是稳定的。只有中质比远小于稳定核的中质比的核素，最后一个质子的结合能才可能为负值，因而可以自发地放射出质子。质子衰变不是一个瞬发过程，由于库仑势垒的阻挡，具有一定的半衰期。至今实验上只找到一个从原子核的同质异能素产生质子衰变的事例。此外，存在缓发质子现象，它是从 β^+ 衰变或轨道电子俘获所形成的子核激发态上发射的质子。

β 衰变 beta decay 原子核自发地放射出电子 e^-、正电子 e^+ 或俘获一个轨道电子 e^- 而发生的核转变的统称。这三种过程分别称为 β^- 衰变、β^+ 衰变或电子俘获。它们可以用公式表示

$$\beta^-\text{衰变}: {}^A_Z X \longrightarrow {}^A_{Z+1}Y + {}^0_{-1}e + \bar{\nu}$$

$$\beta^+\text{衰变}: {}^A_Z X \longrightarrow {}^A_{Z-1}Y + {}^0_{+1}e + \nu$$

$$\text{电子俘获}: {}^A_Z X + {}^0_{-1}e \longrightarrow {}^A_{Z-1}Y + \nu$$

式中 X、Y 分别表示母核和子核，ν、$\bar{\nu}$ 分别表示中微子和反中微子。在 β 衰变中，母核和子核都是相邻的同量异位素。β 衰变本质上是核内中子和质子间的相互转变，即

$$\beta^-\text{衰变}: {}^1_0 n \longrightarrow {}^1_1 H + {}^0_{-1}e + \bar{\nu}$$

$$\beta^+\text{衰变}: {}^1_1 H \longrightarrow {}^1_0 n + {}^0_{+1}e + \nu$$

$$\text{电子俘获}: {}^1_1 H + {}^0_{-1}e \longrightarrow {}^1_0 n + \nu$$

β 衰变能 beta decay energy β 衰变时放出的能量。考虑到中微子的质量为零，则 β 衰变能 $E_d(\beta)$ 为

$$\beta^-\text{衰变}: E_d(\beta) = (m_X - m_Y - m_e)c^2$$
$$= (M_X - M_Y)c^2$$

$$\beta^+\text{衰变}: E_d(\beta) = (m_X - m_Y - m_e)c^2$$
$$= (M_X - M_Y - 2m_e)c^2$$

$$\text{电子俘获}: E_d(\beta) = (m_X + m_e - m_Y)c^2 - W_i$$
$$= (M_X - M_Y)c^2 - W_i$$

式中，M_X、M_Y 分别表示母核原子和子核原子的静质量，W_i 为第 i 层轨道电子的结合能。由此可得出发生 β 衰变的条件 $E_d(\beta) > 0$，即

发生 β^- 衰变的条件：$M_X > M_Y$

发生 β^+ 衰变的条件：$M_X > M_Y + 2m_e$

发生电子俘获的条件：$M_X > M_Y + W_i/c^2$

由于 β^+ 衰变和电子俘获过程都是子核比母核的原子序数减少 1，以及 $2m_ec^2 > W_i$，所以发生 β^+ 衰变的原子核可以发生电子俘获，两者之间存在着竞争。

β 粒子的能谱 energy spectrum of beta particle 原子核 β 衰变时放射出的 β 粒子的能量分布。它具有连续能谱，β 粒子能量的最大值正好是 β 衰变能的值。根据 β 衰变能公式，似乎能量守恒定律与 β 粒子连续能谱发生矛盾。为解决此矛盾，泡利(Pauli)提出了中微子假设。他肯定了能量守恒定律成立，并提出了中微子假设：原子核 β 衰变时，除放出 β 粒子外，还放出极轻的静止质量几乎为零的中性粒子——中微子。这样，β 衰变能 $E_d = E_Y + E_\beta + E_\nu$，式中 E_Y、E_β、E_ν 分别表示子核、β 粒子和中微子的动能。由于子核的反冲动能 $E_Y \approx 0$，所以衰变能 E_d 在 β 粒子和中微子间分配，从而 β 粒子有连续能谱，并且当 $E_\nu = 0$ 时，$E_\beta = E_d$ 为最大值。

电子俘获 electron capture 原子核从核外的电子壳层中俘获一个轨道电子的 β 衰变过程，通常用 EC 表示。如果母核和子核的原子质量差$(M_X - M_Y)$大于第 i 层电子结合能 W_i 相应的质量 W_i/c^2，即 $M_X - M_Y > W_i/c^2$，则可发生第 i 层电子俘获。由于 K 壳层电子最靠近原子核，因而 K 俘获的概率最大，但当 $W_K/c^2 > M_X - M_Y > W_L/c^2$，K 俘获不可能发生，而 L 俘获的概率最大。电子俘获过程一般伴随子核的特征 X 射线发射或俄歇电子发射。

俄歇电子 Auger electron 在轨道电子俘获所形成的原子中，它的内层电子少了一个，外层电子填补内层空位，其能量之差 $W_{内} - W_{外}$。

这一份能量可能不以特征 X 射线形式发出，而是转交给另外一个外层电子，这个外层电子就会克服结合能 $W_{外}$ 而飞出。这种电子称为俄歇电子，它的动能为

$$E_a = (W_{内} - W_{外}) - W_{外} = W_{内} - 2W_{外}$$

实际上，电子俘获过程中，特征 X 射线和俄歇电子的发射之间存在竞争。

双 β 衰变 double beta decay 相邻的稳定的偶-偶同量异位素间发生的发射二个 β 粒子的核转变，实际上是二个单 β 衰变同时发生的过程。这种核转变的结果是子核与母核的电荷数相差 2，而质量数不变。偶-偶同量异位素的质量比相邻奇-奇同量异位素的质量均小，因而通常的单 β 衰变由于能量禁戒而不能发生。但偶-偶同量异位素的质量之间仍有差别；因而可能发生双 β 衰变。到目前为止，可能发生双 β^- 衰变的母核有 35 个，如 ^{48}Ca、^{76}Ge、^{238}U 等；而能发生双 β^+ 衰变的母核只有 6 个，它们是 ^{78}Kr、^{96}Ru、^{104}Cd、^{124}Xe、^{130}Ba 和 ^{136}Ce。此外，还存在发射一个正电子又俘获一个轨道电子或俘获二个轨道电子的双 β 衰变过程。对双 β 衰变的研究，有助于证明反中微子 $\bar{\nu}$ 不同于中微子 ν 的结论。

β 稳定线 beta stability line 把具有 β 稳定性的核素，标绘在 Z—N 平面上，发现这些原子核都集中在一条狭长的区域内，如下页图所示。通过这个 β 稳定区的中心作一条曲线，称为 β 稳定线。对于 $A<40$ 的原子核，β 稳定线近似为直线，$N=Z$，即中质比 $N/Z=1$。对于 $A>40$ 的原子核，β 稳定线的中质比 $N/Z>1$。在 β 稳定线的左上部的核素具有 β^- 放射性，经 β^- 衰变而向 β 稳定线靠拢；在 β 稳定线右下部的核素具有电子俘获或 β^+ 放射性，经电子俘获或 β^+ 衰变而向 β 稳定线靠拢。β 稳定线表示原子核中核子间的相互作用近似地具有电荷无关性。

γ 衰变 gamma decay 又称 γ 跃迁，处于激发态的原子核通过电磁作用放射 γ 射线跃迁到基态或较低激发态的过程。通常表示 $X^* \longrightarrow X+\gamma$，式中 X^* 表示处于激发态的原子核。由于 α 衰变和 β 衰变形成的子核往往处于激发态，因而 γ 衰变通常是伴随 α 或 β 衰变发生的，但 γ 衰变与 α 和 β 衰变不同，它不导致核素的变化，只改变原子核的内部状态，是原子核的同质异能跃迁。

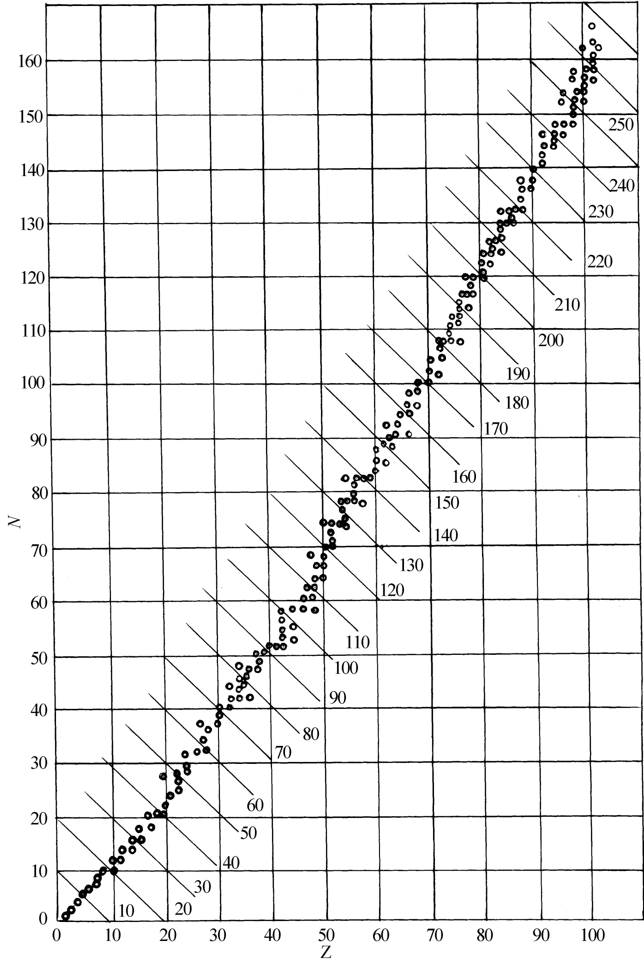
γ 跃迁 gamma transition 见“γ 衰变”。

γ 衰变能 gamma decay energy 原子核初态能量 E_i 与末态能量 E_f 之差为 γ 衰变能 $E_d(\gamma)$，$E_d(\gamma)=E_i-E_f$。这是 γ 射线能量 E_γ 与核反冲动能 E_R 之和，$E_d(\gamma)=E_\gamma+E_R$。一般由于 E_R 较小，所以 γ 光子能量 $E_\gamma \approx E_i - E_f$。γ 光子能量的单一特性反映了原子核激发能级结构的量子化特征。

内转换 internal conversion 原子核从激发态向较低能态跃迁时，可能不发射 γ 光子而是通过原子核电磁场与壳层电子相互作用把激发能直接传给原子的壳层电子使其发射出来，这种现象称为内转换。此过程中发射出来的电子称为内转换电子。根据能量守恒，内转换电子的能量等于跃迁能量 E_γ 和该壳层电子结合能 W_i 之差（$E_\gamma - W_i$）。

γ 辐射的角动量 angular momentum of gamma radiation 设 $\boldsymbol{P}_J$、$\boldsymbol{P}_{J'}$ 和 $\boldsymbol{P}_L$ 分别表示原子核 γ 辐射前后和 γ 辐射的角动量，根据总角动量守恒，γ 辐射的角动量 $\boldsymbol{P}_L=\boldsymbol{P}_J-\boldsymbol{P}_{J'}$，式中 J, J' 是原子核 γ 辐射前后的角动量量子数，L 为 γ 光子的角动量量子数。由于光子的自旋为 1，所以 L 至少为 1. 考虑角动量耦合关系，$L=|J-J'|, |J-J'|+1, \cdots J+J'$（$J=0$, $J'=0$ 除外）。L 值的大小可确定 γ 辐射的极次，与 L 相应的辐射称为 2^L 极辐射。理论可以证明，γ 跃迁概率随 L 增加而急剧下降，对同一对 J, J'，主要跃迁为 $L=|J-J'|$，其他 L 值的跃迁可忽略不计。如果 $J=J'\neq 0$，则 $L=1$。

γ 辐射的宇称 parity of gamma radiation 由于 γ 跃迁为电磁辐射及电磁相互作用中宇称守恒，所以 γ 跃迁要遵从宇称守恒定律。设原子核跃迁前后的宇称分别为 π_i 和 π_f，则 γ 辐射的宇称 π_γ 由 $\pi_i=\pi_f\pi_\gamma$ 确定，因而 $\pi_\gamma=\pi_i/\pi_f=\pi_i\pi_f$（因为 $\pi_f^2=1$）。由此可见，若 γ 跃迁前后原子核的宇称相同，则 γ 辐射具有偶宇称；若 γ 跃迁前后原子核的宇称相反，则 γ 辐射具有奇宇称。



β稳定性的核在 Z— N平面上的标绘

多极辐射 multipole radiation　由多极子产生的辐射。角动量为 L 的 γ 辐射为 2^L 极辐射，$L=1,2,3,\cdots$ 分别相应于偶极辐射、四极辐射、八极辐射…。根据 γ 辐射宇称的不同可分为电多极辐射和磁多极辐射。宇称的奇偶性与 L 的奇偶性相同的为电多极辐射，相应的宇称为 $\pi_\gamma=(-1)^L$；宇称的奇偶性与 L 的奇偶性相反的为磁多极辐射，相应的宇称为 $\pi_\gamma=(-1)^{L+1}$。电多极辐射主要由电荷密度变化引起，而磁多极辐射则是由电流密度引起的。

γ 射线的共振吸收 gamma ray resonance absorption　当入射 γ 射线的能量等于原子核激发能级的能量时所发生的吸收。原子核发射 γ 射线，一般要受到反冲，发射的 γ 射线能量 $E_{\gamma e}$ 与核反冲动能 E_R 之和为原子核激态能量与基态能量之差 E_0，$E_{\gamma e}+E_R=E_0$。同样，处于基

态的同类原子核吸收γ射线时核也会发生同样大小的反冲,激发到能量为 E_0 的激发态所吸收γ光子的能量 $E_{\gamma a}=E_0+E_R$。因此,同一激发态的γ射线发射谱与吸收谱的平均能量之差为反冲动能的二倍 $2E_R$。所以,如果以 Γ 表示反冲核的能级宽度,则发生显著共振吸收的必要条件是 $E_R\leqslant\Gamma$。实际上,因原子核的质量大,一般情况下 $\Gamma<E_R$,故难以观察到原子核的γ射线的共振吸收。必须设法补偿反冲动能的损失,才能观察到γ射线的共振吸收。

穆斯堡尔效应 Mössbauer effect 1955年穆斯堡尔发现的γ辐射的无反冲发射和无反冲共振吸收。穆斯堡尔把发射γ光子的原子核和吸收γ光子的原子核放入固体晶格中,使遭受反冲的不单是原子核本身而是整块晶体,因而使反冲能量接近零以实现γ辐射的无反冲发射和无反冲共振吸收。穆斯堡尔效应有极高的能量分辨本领。例如,用 E_0 和 Γ 表示激发能和能级宽度,对 ^{191}Ir, $\Gamma/E^0=4\times10^{-11}$;对 ^{57}Fe, $\Gamma/E_0=3\times10^{-13}$;而对 ^{67}Zn 的93KeV的γ射线,则有 $\Gamma/E_0=5\times10^{-16}$。因此,利用穆斯堡尔效应,可直接观测核能级的超精细结构以及用来检验广义相对论。

穆斯堡尔谱学 Mössbauer spectroscopy 利用穆斯堡尔效应作为研究原子核周围环境的探针以开展有关物理学、化学、生物学、冶金学、地质学等学科的基础研究和应用研究的边缘学科。它可应用于自然科学的许多学科的基础研究,在微观结构分析中占有重要地位,还可直接应用到一些工业和技术部门,在医学、宇宙学、考古学、环境科学等领域的应用也在发展。

γ射线的吸收 gamma ray absorption γ射线穿过物质时被物质所吸收。它的强度随通过物质的厚度的增加而减弱。实验表明,单色γ射线的强度是随吸收体厚度的增加而按指数规律减弱 $I=I_0e^{-\mu d}$ 或 $I=I_0e^{-\mu_m d_m}$,式中 I_0 和 I 分别为未经过吸收体前及经过吸收体厚度 d(或质量厚度 d_m)时的γ射线的强度,$\mu(\mu_m)$为总的线性(质量)吸收系数。μ_m 与 μ,d_m 与 d 的关系分别为 $\mu_m=\mu/\rho$, $d_m=\rho d$,式中 ρ 为吸收体密度。γ射线通过物质时被吸收而发生光电效应、康普顿效应和电子对产生,总的吸收系数为这三种过程相应的吸收系数之和

$$\mu=\mu_p+\mu_C+\mu_e$$

式中,μ_p、μ_C、μ_e 分别为γ射线通过实物时被吸收而发生光电效应、康普顿效应和电子对产生这三种过程相应的吸收系数。

吸收系数 absorption coefficient 见“γ射线的吸收”。

伦琴(单位) röntgen(unit) X射线或γ射线照射量的单位,记作R。所谓“照射量”是指X射线或γ射线在空气中电离能力的量度,即在空气中产生一种符号的离子的总电荷 dQ 除以空气质量 dm, $X=\dfrac{dQ}{dm}$。规定X射线或γ射线在标准状况下1千克干燥空气中产生每种符号的离子的总电荷为 2.58×10^{-4} 库仑的照射量为1伦琴,$1R=2.58\times10^{-4}C/kg$,这相当于在1立方厘米干燥空气中产生电量各1静电单位的正、负离子(0.2083×10^{10}对离子)的照射量。

吸收剂量 absorbed dose 单位质量的物质所吸收到的辐射剂量,以 D 表示。这是指任何电离辐射授予质量 dm 的物质的平均能量 $d\bar{E}$ 除以 dm 所得的商

$$D=\frac{d\bar{E}}{dm}$$

戈 Gy 国际单位制的吸收剂量单位,以Gy表示。1戈是授予1千克物质1焦耳能量相应的辐射的吸收剂量

$$1Gy=1J/kg$$

拉德 rad 吸收剂量的专用单位,以rad表示。1拉德是授予1克物质100尔格能量相应的辐射的吸收剂量 1rad=100尔格/克$=10^{-2}$ J/kg,因此 $1rad=10^{-2}Gy$。

品质因素 quality factor 表示吸收剂量的微观分布对生物的效应的影响所用的系数,以 Q 表示。它与辐射的类型有关。例如,对于X射线、或γ射线和电子射线,$Q=1$;而对于快中子和α射线,$Q=10$。

剂量当量 dose equivalent 又称生物剂量,

指生物组织中某点处的剂量当量 H 是吸收剂量 D、品质因素 Q 和其他修正因素 N 的乘积，$H=DQN$。对外部照射而言，$N=1$。所以，对外部照射，生物剂量 $H=DQ$。在吸收剂量 D 相同的情况下，对不同类型的辐射（Q 不同），生物剂量可有较大的差别。

雷姆 rem 剂量当量或生物剂量的单位，以 rem 表示。采用雷姆以便统一量度生物所受各种辐射的吸收剂量 $H=DQ$，式中 D 表示吸收剂量（拉德），Q 表示品质因素，H 表示剂量当量（雷姆）。1956 年国际放射防护委员会把放射性工作人员的防护标准定为 0.1 雷姆/周，即 5 雷姆/年。对于 X 射线或 γ 射线，这个标准相当于在 2.5 毫雷姆/小时或 0.69 微雷姆/秒的剂量率照射下每周持续工作 40 小时。

重碎片放射性 heavy fragment radioactivity 又称重离子放射性，它是指重核自发地放射 ^{14}C、^{24}Ne、^{28}Mg 等中等质量离子的衰变过程。1984 年，Rose 和 Jones 首先发现核 ^{223}Ra 除发射 α 粒子外，还能发射 30MeV 的 ^{14}C 核，其分支比为 $10^{9}:1$。接着 Price 等人发现镭的另两种同位素 ^{222}Ra 和 ^{224}Ra 也能发射 ^{14}C，并且发现 ^{232}U 可以发射 ^{24}Ne。他们于 1987 年还发现 ^{234}U 不仅能发射 ^{24}Ne，而且能发射 ^{28}Mg。至今已发现近 10 个重碎片放射性同位素。重碎片放射性与 α 衰变和自发裂变相比有如下特点：衰变的分支比小；重碎片衰变所发射的重离子能量小，约为 2MeV/核；重碎片衰变发射的离子为偶 Z 核，留下的母核接近于双幻核 ^{208}Pb。关于重碎片放射性的理论和实验还在进一步研究中。

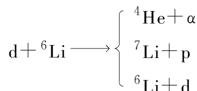
放射性同位素 radioactive isotope 某种元素的具有放射性的同位素，称为放射性同位素。放射性同位素的原子核能自发地放出 α 射线、β 射线，同时一般还伴有 γ 射线放出。现有的 2000 多种放射性同位素绝大部分是人工产生的。人工产生放射性同位素主要是利用加速器和反应堆来进行的。放射性同位素在工业、农业和医疗事业等方面的应用，已表明它具有极重要的价值和广阔的发展前景。

示踪原子 tagged atom 作为显示踪迹的放射性同位素的原子。由于放射性原子的放射作用，容易用仪器探测它的踪迹。可以利用示踪原子为显示踪迹的工具，在工业、农业、医疗卫生以及其他科学研究中有广泛应用。例如把少量放射性磷 ^{32}P 加在肥料中，它被植物吸收后在植物体内输运的情况，可以用仪器测出。

四、原子核反应
Nuclear Reaction

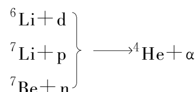
核反应 nuclear reaction 入射粒子和原子核发生碰撞，导致原子核质量、电荷或能量状态改变的过程。核反应一般可表示为 $a+X \longrightarrow Y+b$，式中 a 和 X 分别表示入射粒子和靶核，Y 和 b 分别表示剩余核（生成核）和出射粒子，简记为 X(a,b)Y 或 X(a,b)。当入射粒子能量较高时，出射粒子可以不止一个，而有二个或二个以上。入射粒子能量可以从低于 1eV 到高达几亿 eV。在 50MeV 以下的称为低能核反应，在 50MeV～1GeV 的称为中能核反应，1GeV 以上的称为高能核反应。一般的原子核物理只涉及低能核反应。在所有核反应中，电荷、核子数、能量、动量、角动量、宇称等服从守恒定律。核反应中所产生的反应物可以是稳定的，也可能是具有放射性的。

反应道 reaction channel 对应于每一种核反应过程，称为一个反应道。反应前的道称为入射道，反应后的道称为出射道。对于同一个入射道，可以有若干个出射道，例如



$$d+{}^{6}Li \longrightarrow \begin{cases} {}^{4}He+\alpha \\ {}^{7}Li+p \\ {}^{6}Li+d \end{cases}$$

同样，对于同一个出射道，也可以有若干个入射道，例如



$$\left.\begin{matrix} {}^{6}Li+d \\ {}^{7}Li+p \\ {}^{7}Be+n \end{matrix}\right\} \longrightarrow {}^{4}He+\alpha$$

产生各种反应道的概率是不等的，而且这种概率随入射粒子能量的变化而不同。

实验室系和质心系 laboratory system and centre of mass system 实验室系即实验室坐标系，简称 L 系，是指坐标原点固定在实验室中某一点（如核反应实验中的靶核）的坐标系。

质心系即质心坐标系，简称C系，是指坐标原点固定在系统诸粒子的质心（如核反应中入射粒子和靶核的质心）上的坐标系。实验数据是相对于L系而言，而理论处理中先把质心的匀速运动分离出去，采用C系后，两坐标系的物理量应作如下的相互转换。入射粒子的相对运动动能，即入射粒子a和靶核X相对于质心运动的动能 E' 与入射粒子在L系中的动能 E_a 的关系为 $E'=\frac{m_X}{m_a+m_X}E_a$，式中 m_a 和 m_X 分别为入射粒子和靶核的质量；在L系和C系中的出射角 θ_L 和 θ_C 之间的关系为

$$\cos\theta_L=\frac{\gamma+\cos\theta_C}{(1+\gamma^2+\gamma\cos\theta_C)^{1/2}}$$

式中 γ 是质心在L系中的速度 v_c 与出射粒子 b 在C系中的速度 v'_b 的比值 $\gamma=v_c/v'_b$。用质量数 A 表示时

$$\gamma=\left(\frac{A_aA_b}{A_XA_Y}\frac{E'}{E'+Q}\right)^{1/2}$$

式中 A_a、A_b、A_X 和 A_Y 分别是入射粒子、出射粒子、靶核和剩余核的质量数，E' 为入射粒子的相对运动动能，Q 为反应能。

反应能 reaction energy 在核反应过程中，各反应生成物的动能总和减去各反应物的动能总和，称为反应能，以 Q 表示。$Q>0$ 称为放能反应，$Q<0$ 称为吸能反应。对于核反应X(a,b)Y，入射粒子、靶核、剩余核和出射粒子的静止质量分别为 m_a、m_X、m_Y 和 m_b，其动能分别为 K_a、K_X、K_Y 和 K_b。由于粒子的总能量 $E=K+mc^2$，根据核反应过程中能量守恒定律，$E_a+E_X=E_Y+E_b$，可得

$$\begin{aligned}Q&=(K_Y+K_b)-(K_a+K_X)\\&=[(m_a+m_X)-(m_Y+m_b)]c^2\end{aligned}$$

由此可见，Q 值既可以由粒子的静止质量算出，也可以通过实验测量核反应前后各粒子的动能求得。

***Q* 方程 *Q*-equation** 即反应能方程，它表示反应能 Q 与入射粒子动能、出射粒子动能和有关粒子质量或质量数的关系的方程式。在实验室系中，靶核静止，其动能 $K_X=0$，根据能量守恒和动量守恒，可得 Q 方程

$$Q=\left(\frac{m_a}{m_Y}-1\right)K_a+\left(\frac{m_b}{m_Y}+1\right)K_b-\frac{2(m_am_bK_aK_b)^{1/2}}{m_Y}\cos\theta$$

或

$$Q=\left(\frac{A_a}{A_Y}-1\right)K_a+\left(\frac{A_b}{A_Y}+1\right)K_b-\frac{2(A_aA_bK_aK_b)^{1/2}}{A_Y}\cos\theta$$

式中 m_a、m_b、m_Y 及 A_a、A_b、A_Y 分别表示入射粒子、出射粒子和生成核的静止质量及相应的质量数，K_a、K_b 为入射粒子和出射粒子的动能，θ 为出射粒子相对于入射粒子方向间的夹角。利用 Q 方程，只要测量 θ 角方向出射粒子的动能 K_b（K_a 是已知的），就可以由反应前后各粒子质量或质量数求得生成核处于基态时的反应能。

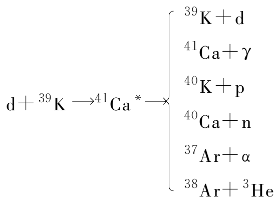
阈能 threshold energy 引起某种核反应所需的入射粒子动能（实验室系）的最小值，以 E_{th} 表示。对于吸能反应，$E_{th}=\frac{m_a+m_X}{m_X}|Q|$，式中 m_a 和 m_X 分别为入射粒子和靶核的质量，Q 为反应能。对于放能反应，E_{th} 原则上为零。不过，对于某些放能核反应，由于库仑势垒的作用，还存在一定的反应阈，但它已不属于一般所说的阈能。

复合核 compound nucleus 入射粒子被靶核吸收而形成的一个中间过程的原子核。当入射粒子射入靶核后，它与周围核子发生强烈作用而把能量传给附近核子，这些核子又把能量传给自己周围核子。这样，经过多次碰撞，最后核子间的能量传递达到动态平衡，从而形成了复合核，由于复合核是靶核和入射粒子组成，至少相差一个入射粒子的分离能，因而复合核总是处于它的激发态。

复合核的激发能 excitation energy of compound nucleus 根据能量守恒，复合核的激发能 E^* 应该由两部分组成，一部分是入射粒子的相对运动动能 $E'=\frac{m_X}{m_a+m_X}E_a$，式中 m_a、m_X 分别为入射粒子和靶核的质量，E_a 为入射粒子在实验室系中的动能，另一部分为入射粒子和靶核的结合能 E_{aX}。所以，复合核的激发

能 $E^{*}=\frac{m_X}{m_a+m_X}E_a+E_{ax}$。由实验测得入射粒子的动能 E_a 和入射粒子 a 和靶核 X 形成复合核的结合能 E_{ax}，可算出复合核的激发能。

复合核反应　compound nucleus reaction　通过复合核这一中间阶段发生的核反应过程。低能核反应大多属于复合核反应，它可表示为 $a+X\longrightarrow C^{*}\longrightarrow Y+b$，式中 C^{*} 表示复合核。早在 1936 年尼•玻尔提出了复合核模型，他假定复合核反应能够作为一个两步过程来描述，第一步形成达到了统计平衡的复合核，随后复合核发生衰变，而衰变与复合核的形成的历史过程无关。复合核的衰变方式一般不只一种，通常可以发射中子、质子、α 粒子或 γ 光子等，各种衰变方式各具有一定的概率，这种概率的大小仅决定于复合核本身的性质，而与复合核的形成方式无关。例如能量 2MeV 的氘核与 ^{39}K形成的复合核$^{41}Ca^{*}$可以有六种衰变方式



$$d+{}^{39}K\longrightarrow{}^{41}Ca^{*}\longrightarrow\begin{cases}{}^{39}K+d\\{}^{41}Ca+\gamma\\{}^{40}K+p\\{}^{40}Ca+n\\{}^{37}Ar+\alpha\\{}^{38}Ar+{}^{3}He\end{cases}$$

这六种衰变方式的相对概率完全由$^{41}Ca^{*}$本身的性质决定，与$^{41}Ca^{*}$的形成方式无关。在适当条件下，原则上任何一个衰变道都可用作入射道形成相同的复合核$^{41}Ca^{*}$，它同样具有六种衰变方式。

直接反应　direct reaction　一般的核反应可以不经过形成复合核过程，直接从初态（入射道）立即通向末态（出射道）的核反应。这类反应是入射粒子仅与靶核少数几个自由度发生作用。当入射粒子能量不高时的直接反应，主要是入射粒子和靶核表面那些结合最松的核子发生表面直接作用，或把它的部分能量传给靶核引起剩余核的集体激发。入射粒子能量超过 50MeV 时的直接反应，不仅可打出靶核表面的核子，而且还可把内部核子打出而发生体内直接作用。此外，还有削裂反应和拾取反应等。

削裂反应　stripping reaction　入射粒子打到靶核边上，其中一个或几个核子被靶核俘获，其他部分继续飞行前进的直接反应。显然，能够引起削裂反应的入射粒子至少要由两个核子组成。最重要的削裂反应是由氘核引起的核反应，如(d,p)，(d,n)，也有氚 t(^{3}H)或^{3}He作为入射粒子引起的削裂反应，如(t,d)或(^{3}He,d)。削裂反应主要应用于从反应产物角分布定出核能级的自旋和宇称。

拾取反应　pick-up reaction　入射粒子从靶核拾取靶核内的一个或几个核子结合成比入射粒子重的粒子继续向前飞行的核反应，这也是一种直接反应。例如在(p,d)，(n,d)，(p,t)，(p,α)，(^{3}He,α)等反应中观测到拾取反应。拾取反应是削裂反应的逆过程。

敲出反应　knock-out reaction　入射粒子直接撞击靶核中的一个或几个粒子而使其飞出靶核，本身进入靶核内或在靶核外继续行进的反应。这也是一种直接反应，例如(α,p)，(d,p)，(n,p)等为直接敲出质子 p 而入射粒子则留在靶核内的敲出反应。(p,2p)，(n,2n)，(n,np)等入射粒子留在靶外的敲出反应也很重要，因为这导致三体反应（核反应末态有三个物体）的产生。用较高能量入射粒子进行敲出反应实验是研究内壳层核子结构的重要手段。

电荷交换反应　charge exchange reaction　入射粒子与靶核相互作用时只交换电荷而不交换核子的反应。这也是一种直接反应，例如有些(p,n)和(^{3}He,t)反应是最常见的电荷交换反应。这种反应是通过入射粒子与靶核中核子交换介子而发生电荷交换。

中子核反应　neutron reaction　中子与原子核作用而引起的核反应。由于中子与靶核相互作用时不存在库仑势垒的阻挡，因此能量很低的中子也能与靶核作用而引起核反应，而且低能中子引起的核反应截面可以很大，因而使中子核反应在核能利用和核技术应用方面有极重要意义。对于不同能量的中子和不同的靶核，反应的类型有所不同。中子核反应大致有以下几种：弹性散射(n,n)、非弹性散射(n,n′)、辐射俘获(n,γ)、裂变(n,f)以及其他各种核反应，如(n,p)、(n,α)、(n,2n)、(n,3n)、(n,np)等。

带电粒子核反应 charged particle reaction 带电粒子与靶核相互作用而引起的核反应。它可分为质子p引起的核反应,如(p,p)、(p,n)、(p,α)等反应;氘核d引起的核反应,如(d,p)、(d,α)等反应;α粒子引起的核反应,如(α,p)、(α,n)等反应;重离子引起的核反应,如(^{12}C,4n)、(^{16}O,α3n)等反应。带电粒子与靶核作用时,由于库仑势垒的阻挡,能量低于库仑势垒的粒子引起反应的概率是不大的。除少数轻靶核外,当入射粒子能量低于0.1MeV时,反应截面已小到实验无法观测。当入射粒子能量足够高时,可以产生辐射俘获,中子发射或其他带电粒子,还可以产生弹性散射和非弹性散射。

重离子反应 heavy-ion reaction 指比α粒子重的离子引起的核反应。重离子反应的特点是库仑作用强、复合核的激发能高、复合核的角动量大、重离子的波长短和入射粒子种类多等。重离子和靶核相互作用时,可按相互作用的深浅程度分为远距离相互作用(只发生卢瑟福散射和库仑激发)、擦边相互作用或表面相互作用、深度非弹性散射和熔合反应等四类。重离子反应是低能核物理的一个重要研究领域,它为新核素产生等有关核结构和核反应机制的基础研究提供了条件,同时重离子束在原子、分子物理、固体物理、材料科学、放射治疗、探伤等方面有重要应用。1989年我国建成了兰州重离子加速装置,它能加速的离子种类从C到Xe,现可为全国开展各项研究。

熔合反应 fusion reaction 重离子核反应的一类,指碰撞的原子核熔合成一个复合系统的反应。当碰撞的原子核之间的相对运动动能接近或稍高于它们的库仑势垒使它们接近到有一定重叠就可熔合成一个复合系统。事实上,只要两个碰撞原子核中至少有一个是轻核,熔合过程就是主要反应道。

辐射俘获 radioactive capture 指入射粒子a被靶核X俘获而放出γ射线的核反应过程。通常表示为a+X$\longrightarrow$Z+γ,式中Z为a被X俘获的生成核。在此反应中,反应能$Q>0$,其值为粒子a在生成核Z中的结合能。

光核反应 photonuclear reaction 光子(γ射线)与原子核相互作用引起的核反应。常见的类型有(γ,n)和(γ,p)反应。γ射线与原子核之间没有核力作用,只有电磁相互作用,所以光核反应是由电磁相互作用引起的。光核反应是一种有阈能的反应,例如(γ,n)和(γ,p)反应的阈能就是靶核中最后一个中子和质子的结合能。(γ,n)反应的产额较大,而且接近阈能时的反应截面,不像带电粒子那样,要受到库仑势垒的限制。所以,通过(γ,n)反应阈能的测量,可以较精确地获得最后一个中子的结合能。

人造元素 artificial elements 用人工方法制造的元素。有些化学元素在自然界的丰度非常小,或根本不存在,因此,为了需要,必须用人工方法在实验室中制造。这些人造元素包括锝($_{43}Tc$)、钷($_{61}Pm$)、砹($_{85}At$)、钫($_{87}Fr$)以及所有超铀元素。人造元素一般用加速器或反应堆通过一定的核反应而生成。例如,锝是用氘核轰击钼($_{42}Mo$)而成;钷是用中子照射钕($_{60}Nd$)并经β衰变而得,也可以是铀的裂变产物;砹是用α粒子轰击铋($_{83}Bi$)而产生;钫则是钍($_{90}Th$)或铀($_{92}U$)分裂后的产物。人造元素都是放射性元素,它们除不稳定性和放射性外,与相应的天然元素具有相同的化学和物理性质。

超铀元素 transuranic elements 电荷数$Z>92$的元素。早在1934年,费米设想,如果用中子轰击^{238}U,也能得到β放射性同位素,从而有可能得到超铀元素$^{239}_{93}Np$和$^{239}_{94}Pu$。现在还可用α粒子及一些重离子作入射粒子得到超铀元素。目前报道,俄罗斯科学家已合成了$Z=114$的超铀元素,其质量数为289。

超重原子 superheavy atom 当电荷数分别为Z_1和Z_2的两个原子核近距离碰撞时,最内层电子被束缚在电荷数Z_1+Z_2(大大超过目前已知元素的电荷素114)的核上,形成的一个短寿命的原子。

弹性散射 elastic scattering 核反应中出射粒子和入射粒子相同的称为散射。弹性散射是指总动能保持不变且原子核内部能量也不发生变化的散射过程。弹性散射可表示为a+X$\longrightarrow$X+a或X(a,a)X,式中X同时表示靶核

和剩余核,例如 $p+{}^{12}C \longrightarrow {}^{12}C+p$ 为质子 p 在 ${}^{12}C$ 上的弹性散射。

非弹性散射 inelastic scattering 指总动能发生改变且原子核内部能量发生改变的散射过程。最常见的非弹性散射是剩余核处于激发态的情况。非弹性散射可表示为 $a+X \longrightarrow X^*+a'$ 或 $X(a,a')X^*$,式中 a,a' 分别表示入射粒子和出射粒子,X 和 X^* 分别表示靶核和剩余核,例如 $p+{}^{12}C \longrightarrow {}^{12}C^*+p'$ 为质子在 ${}^{12}C$ 上的非弹性散射。

截面 cross section 有效截面的简称,它是微观粒子间发生某种特定过程的概率的量度。设有强度(单位时间通过单位横截面的粒子数)N 的 A 种粒子通过由密度为 n 的 B 种粒子组成的介质并发生相互作用,使 A 种粒子和 B 种粒子发生某种特定过程,从而使 A 种粒子流在 B 种粒子间经过 ΔX 路程后强度减少 ΔN,则以 $\sigma=\frac{1}{N}\ \frac{\Delta N}{n\Delta X}$ 作为这两种粒子相互作用发生某种特定过程的截面。由于 ΔN 为单位时间发生该特定过程的 A 种粒子数,$n\Delta X$ 为靶介质单位面积的 ΔX 薄层中的 B 粒子数,所以 $\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{n\Delta X}$ 则表示每一入射粒子与每单位面积内一个靶粒子发生该特定过程的概率,σ 具有面积量纲,因而又称为截面。根据发生作用过程的类型不同,有反应截面、散射截面、辐射俘获截面、吸收截面和裂变截面等。反应截面为入射粒子与靶核之间发生某种核反应的截面;散射截面为入射粒子与靶核相互作用发生散射过程的截面;辐射俘获截面为入射粒子与靶核相互作用发生俘获过程的截面;吸收截面为入射粒子与靶核相互作用而被靶核吸收的截面;裂变截面为入射粒子与靶核相互作用发生裂变过程的截面。

靶恩 barn 截面 σ 的单位常采用 10^{-24} cm^2,称为"靶恩",记作 b。于是

$$1\ b=10^{-24}\ cm^2$$

$$1\ mb=10^{-27}\ cm^2$$

$$1\ \mu b=10^{-30}\ cm^2$$

反应截面 reaction cross-section 见"截面",实际上,所有过程的截面都是反应截面。

散射截面 scattering cross-section 见"截面"。在散射过程中,若粒子的总动能不变,则此散射截面称为弹性散射截面,否则称为非弹性散射截面。

辐射俘获截面 radioactive capture cross-section 见"截面"。

吸收截面 absorption cross-section 见"截面"。

裂变截面 fission cross-section 见"截面"。

全截面 total cross-section 入射粒子与特定靶核发生所有各种相互作用的截面之和,以 σ_t 表示。其中某种相互作用的截面称为分截面,所以全截面为各种分截面之和。

激发曲线 excitation curve 用横坐标表示入射粒子能量,纵坐标表示核反应截面描绘的核反应截面随入射粒子能量变化的关系曲线。对于不同的反应道,可以画出不同形状的关系曲线。因此,激发曲线的测量是核反应研究的重要工作。

微分截面 differential cross-section 出射粒子在特定方向每单位立体角反应截面。通常微分截面是指出射粒子在特定方向附近单位立体角的反应截面,以 $\sigma(\theta,\varphi)$ 表示,其中 θ,φ 是出射粒子在实验室系的球坐标空间的方位角(θ,φ),若以 I 表示单位时间的入射粒子数,N_s 表示单位面积靶上的靶核数,$\mathrm{d}N'/\mathrm{d}\Omega$ 表示单位时间出射至(θ,φ)方向立体角 $\mathrm{d}\Omega$ 内的粒子数,则有 $\sigma(\theta,\varphi)=\frac{\mathrm{d}N'}{IN_s\mathrm{d}\Omega}$,常用单位为靶恩/球面度 $(b\cdot sr^{-1})$ 或 $mb\cdot sr^{-1}$。微分截面比全截面或分截面能更细致地反映核反应的特征,是核反应研究中的一个重要物理量,它既可以由实验测定,也可以由理论推导得出,便于对实验和理论进行比较。

角分布 angular distribution 核反应过程中产生的粒子或光子的强度随相对于某个参考方向的角度变化的分布。最常见的角分布是截面角分布,它是微分截面 $\sigma(\theta)$ 随相对于入射粒子束方向的出射角 θ 变化的分布。对于一确定的反应道,角分布的形状一般与入射粒子的能量变化有关。角分布的测量在核理论研究和实际应用中都有重要意义。

散射振幅 scattering amplitude 当入射粒子受到靶核的势散射时，沿着球坐标(θ, φ)方向传播的散射波的振幅，以$f(\theta, \varphi)$表示。入射粒子与靶核的相对运动波函数在$r \to \infty$处的渐近形式为$\psi(\boldsymbol{r}) \xrightarrow[r \to \infty]{} e^{ikz} + \psi_{sc}$，式中第一项为$Z$方向传播的波数为$k$的平面波，第二项散射波为球面波形式，$\psi_{sc} = f(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$，其中$f(\theta, \varphi)$为散射振幅。当势场为有心势时，$f(\theta, \varphi) = f(\theta)$。可以证明，散射的微分截面$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$。这一结果是指弹性散射截面。

势散射 potential scattering 入射粒子受到由一定的势场的散射。例如电子在原子的库仑场中的散射。核反应问题中往往用等效相互作用势，即含虚部的光学势，表示入射粒子与靶核之间的相互作用，因而可以把问题归结为光学势散射和吸收问题。

卢瑟福散射 Rutherford scattering 一个荷电量$Z_1 e$的入射粒子在电荷数为Z_2的靶核的库仑势场作用下发生的弹性散射。卢瑟福(Rutherford)在1911年用α粒子束轰击金属箔发现了大角度α粒子散射。卢瑟福用经典力学方法推导出入射粒子与靶核的卢瑟福散射微分截面在质心系中的表达式

$$\Gamma_k(\theta_C) = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}\right)^{1/2} \frac{1}{16\sin^4(\theta_C/2)}$$

式中θ_C是质心系的散射角，E为相对运动动能。

莫特散射 Mott scattering 在库仑势场作用下，与靶核相同的入射粒子和靶核发生的弹性散射。设入射粒子和靶核的电荷数为Z，相对运动动能为E，考虑全同粒子效应，莫特散射的微分截面为

$$\sigma(\theta_C) = \frac{Z^4 e^4}{16E^2}\left\{\csc^4\left(\frac{\theta_C}{2}\right) + \sec^4\left(\frac{\theta_C}{2}\right) + \frac{(-1)^{2J}}{2J+1}\csc^2\left(\frac{\theta_C}{2}\right)\sec^2\left(\frac{\theta_C}{2}\right)\cos\left[\frac{Z^2 e^2}{\hbar v}\ln\left(\tan^2\frac{\theta_C}{2}\right)\right]\right\}$$

式中J为靶核的自旋，v为相对运动速度。

库仑激发 Coulomb excitation 靶核在入射荷电粒子的库仑力作用下跃迁到一个受激能级，导致靶核的激发。它是由库仑势场作用引起的非弹性散射。由于库仑激发仅包含电磁相互作用，不受复杂的核相互作用干扰，所以库仑激发对于研究变形核的低位能级有重要意义，同时也是探测和分析原子核低激发态的一种实验方法。

共振散射 resonance scattering 有两种共振散射：复合核共振散射和势共振散射。

当入射粒子能量恰好在复合核共振能级上，入射粒子被靶核吸收并形成复合核，此后再发射与入射粒子同种类型粒子的过程，称为复合核共振散射。

当相对运动轨道角动量为l的低能粒子受到一个势阱的散射时，只有这个势阱具有相同l值的近于零的能级(称为虚能级)，能量正好等于虚能级的入射粒子受到该势场的散射过程，称为势共振散射。

光学模型 optical model 描写核反应过程初始阶段的模型理论。光学模型认为，如同光波入射到玻璃上，一部分发生反射或折射，一部分被吸收，反射或折射部分相当于入射粒子发生弹性散射，吸收的部分相当于入射粒子被靶核吸收，引起核反应。光学模型的理论处理是：对入射粒子与靶核的作用引入一个复数势阱

$$V(r) = \begin{cases} -(V_0 + \mathrm{i}W), & r \leqslant R \\ 0, & r > R \end{cases}$$

式中R为核半径，$W = 0.03V_0$，$V_0 = 42\,\mathrm{MeV}$，把复数势阱代入薛定谔方程求解，然后计算散射截面、吸收截面以及角分布。

五、原子核裂变和聚变
Nuclear Fission and Fusion

核裂变 nuclear fission 重核分裂成几个中等质量原子核的现象。通常把重核分裂成二个碎片的过程叫二分裂变，把重核分裂成三块或四块的裂变叫三分裂变或四分裂变。早在1938年，哈恩(Hahn)和斯特拉斯曼(Strassmann)发现，中子轰击铀、钍等重核发生二分裂变。1947年，钱三强和何泽慧首先观察到中子

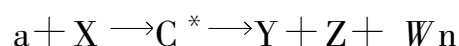
轰击铀的三分裂变。

二分裂变　binary fission　见“核裂变”。

三分裂变　ternary fission　见“核裂变”。

自发裂变　spontaneous fission　原子核在无外来粒子的轰击下自行发生的裂变。通常只有很重的原子核才能进行自发裂变。然而很重的核大多数具有α放射性，可见重核的自发裂变中存在与α衰变的竞争。对于 $Z\approx92$ 的核素，自发裂变概率比α衰变概率小得多。随着 Z 和 N 的增大，自发裂变相对于α衰变的概率逐渐增大。例如 ${}^{282}_{98}\mathrm{Cf}$ 的自发裂变分支比约占3%，而 ${}^{284}_{98}\mathrm{Cf}$ 的自发裂变分支比竟达99.7%。这一裂变为强中子源的获得提供了重要途径。

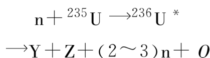
诱发裂变　stimulated fission　在外来粒子的轰击下重原子核发生的裂变。诱发裂变可以看做核反应的一个反应道，记作 X(a,f)，其中 a 表示入射粒子，X 为靶核，f 表示裂变。对于二分裂变，可表示为



$$a+X\longrightarrow C^{*}\longrightarrow Y+Z+Wn$$

它表示复合核 C^{*} 可分裂成碎片 Y、Z 并放出 W 个中子 n。通常具有一定能量的入射粒子，如中子 n、γ、p、d、α 和重离子等都可以引起核裂变。光致裂变(γ,f)的概率较小，带电粒子与靶核间由于库仑势垒作用而发生裂变的概率也较小。由于中子与靶核间没有库仑势垒作用，很低能量的中子就可引起核裂变，因而这种裂变概率较大，研究的最多。

中子诱发裂变　neutron stimulated fission　中子轰击靶核引起的裂变。例如热中子轰击 ${}^{235}\mathrm{U}$ 发生的裂变可表示为



$$n+{}^{235}U\longrightarrow{}^{236}U^{*}$$
$$\longrightarrow Y+Z+(2\sim3)n+Q$$

式中 Y、Z 为裂变碎片，裂变放出2～3个中子，Q 为裂变能，约为200MeV。设 I_n 为单位时间入射的中子数，N_s 为单位面积的靶核数，I_f 为单位时间发生的裂变数，则中子裂变截面 $\sigma_f=I_f/I_nN_s$。实验表明，核素 ${}^{238}\mathrm{U}$ 对热中子的裂变截面为零，而 ${}^{233}\mathrm{U}$、${}^{235}\mathrm{U}$ 和 ${}^{239}\mathrm{Pu}$ 对热中子的裂变截面都比较大。其中天然的 ${}^{233}\mathrm{U}$ 和 ${}^{239}\mathrm{Pu}$ 不存在，只能靠反应堆产生，${}^{235}\mathrm{U}$ 的天然丰度只有0.7%。天然铀中主要是丰度为99.3%的 ${}^{238}\mathrm{U}$，它虽不能与热中子发生裂变反应，却能与快中子进行裂变反应。

裂变势垒　fission barrier　按照液滴模型，核裂变时从基态形变到断点形变之间需经过的势垒，它是由库仑能和表面能随形变的变化而决定的。中等质量的原子核，裂变势垒很高，不容易发生裂变。重核的裂变势垒比较低，在容易发生核裂变的锕系核素中，裂变势垒的高度约为6MeV，只有当复合核的激发能 E^{*} 大于裂变势垒高度时，才能发生核裂变。

链式反应　chain reaction　能够自持进行的核裂变反应。例如，${}^{235}\mathrm{U}$ 吸收一个热中子，形成复合核，随后发生裂变 ${}^{1}_{0}\mathrm{n}+{}^{235}\mathrm{U}\longrightarrow{}^{236}\mathrm{U}^{*}\longrightarrow\mathrm{Y}+\mathrm{Z}+(2\sim3){}^{1}_{0}\mathrm{n}+Q$。由于裂变碎块内含有过多中子，是不稳定的，因此裂开后立刻放出2～3个中子，同时释放出约200MeV的能量。新一代中子中如果至少有一个被附近的 ${}^{235}\mathrm{U}$ 吸收并又引起裂变，再产生第二代中子，依此类推，于是就能形成一个自持过程，即链式反应。

增殖系数　multiplication factor　又称增殖因数或倍增系数，在某一时间间隔内所产生的中子总数与同一时间间隔内吸收和泄漏损失的中子总数之比。对无限介质，这一系数 k_∞ 称为无限倍增系数；在有限大小的反应堆中，这一系数称为有效倍增系数 k_{eff}。k_∞ 只是介质的函数，k_{eff} 除与介质有关外，还与反应堆的形状、大小有关。维持链式反应的条件是增殖系数 $k\geqslant1$。若反应堆系统的 $k_{\mathrm{eff}}=1$，则系统内中子的产生率正好等于中子的损失率，链式反应将以恒定的速度不断地进行下去。

临界大小　critical size　裂变物质能够产生链式反应所需的最小体积。它不是一个常数。以核反应堆为例，临界大小与可裂变物质（如 ${}^{235}\mathrm{U}$）的含量百分比、减速剂的材料、铀棒在减速剂内的分布以及反射层等有关。

原子弹　atomic bomb　利用快中子链式反应而发生原子爆炸的武器。原子弹是由两块各小于临界体积的纯 ${}^{235}\mathrm{U}$ 块（对应的临界质量约为1公斤）组成。平时使这两块 ${}^{235}\mathrm{U}$ 相隔一定距离，故不会爆炸。使用时，可利用引爆装置，使它们骤然合为一体，其体积超过了临界体

积，这一体积如为球状其直径不过 5 厘米而快中子速度却为每秒二万公里，故裂变进行得极其迅速剧烈，可在百万分之几秒内引起原子弹爆炸。

核裂变反应堆　nuclear fission reactor　简称核反应堆或反应堆，一种能维持并可控制的中子诱发的自持链式核裂变反应装置。世界上第一座反应堆于 1942 年在美国芝加哥大学由费米领导建成，是一座天然铀和石墨均匀布置的热中子反应堆。反应堆包括的主要组成部分为裂变燃料、减速剂、控制棒、冷却剂、反射层和保护墙等。它的主要用途：获得原子能、作为中子源和制造放射性同位素等。

动力堆　power reactor　主要用来生产动力的反应堆，它包括发电用堆、推进用堆和工业用热堆等。

生产堆　production reactor　主要用于生产易裂变材料和其他材料，或进行工业规模辐照用的热中子反应堆，它包括钚生产堆、同位素生产堆和辐照用堆等。

核裂变燃料　nuclear fission fuel　放在反应堆内、含有易裂变核素、能实现自持链式反应的核裂变材料。实际可用的核裂变材料有三种同位素：铀 ^{235}U、钚 ^{239}Pu 和铀 ^{233}U。自然界中的天然铀是 ^{235}U 和 ^{238}U 的混合，它们的丰度分别为 0.7% 和 99.3%。^{239}Pu 和 ^{233}U 在自然界中不存在，只能用铀 ^{238}U 和钍 ^{232}Th 作转换材料使其在反应堆中产生：$^{1}_{0}n + ^{238}_{92}U \longrightarrow ^{239}_{92}U$，$^{239}_{92}U \xrightarrow{\beta} ^{239}_{93}Np \xrightarrow{\beta} ^{239}_{94}Pu$；$^{1}_{0}n + ^{232}_{90}Th \longrightarrow ^{233}_{90}Th$，$^{233}_{90}Th \xrightarrow{\beta} ^{233}_{91}Pa \xrightarrow{\beta} ^{233}_{92}U$。早期的反应堆均使用天然铀为核燃料。目前大部分动力堆和研究堆多采用浓缩铀燃料。原子弹和快中子堆采用高浓缩铀或钚作核燃料。

浓缩铀　enriched uranium　又称富集铀，同位素 ^{235}U 的丰度大于其天然丰度的铀。浓缩铀是在消耗大量电能的同位素分离工厂中以天然铀为原料生产出来的。

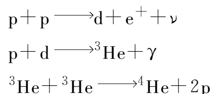
减速剂　moderator　又称慢化剂，核反应堆中用以降低中子能量的材料。通过高能中子与减速剂核的散射反应而使中子减速。选择减速剂要求其对中子具有较大的散射截面和较小的吸收截面。常用的减速剂有石墨、重水和铍等。

冷却剂　coolant　又称载热剂，循环通过核反应堆用以载出裂变放出热能的流体。冷却剂可以是液体水、重水或钠，也可以是气体氦或二氧化碳。其中重水和轻水既可用作冷却剂又可用作减速剂，相应的反应堆称为重水堆或轻水堆。

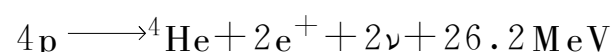
控制棒　control bar　指控制链式反应强度的控制棒。由于镉和硼对慢中子有很大的俘获截面，所以一般由镉或硼钢制成控制棒。这种控制棒能灵活地插入和抽出反应堆中心区。当反应太强时，把控制棒插入以增加对中子的吸收；当反应不足时，把控制棒抽出少许以减少对中子的吸收。反应堆中装有中子强度检测器和用以自动操纵控制棒升降的机器。

核聚变　nuclear fusion　轻原子核聚合成较重原子核的反应过程。由于轻核的核子平均结合能小于 A＝40～120 的核的核子平均结合能，因而轻核聚变过程中会释放巨大能量。但是，由于原子核均带正电，相互之间存在库仑斥力，一般条件下发生聚变的概率极小。自然界中只有在太阳等恒星内部，因温度极高，轻核才有足够的动能克服库仑势垒，形成持续的核聚变。目前，人工核聚变可以用氢弹爆炸来实现。

质子-质子循环　proton-proton cycle　四个质子聚变结合成一个 ^{4}He 的反应过程。它是太阳和其他恒星中存在的聚变过程之一，具体反应过程为



$$p + p \longrightarrow d + e^{+} + \nu$$
$$p + d \longrightarrow ^{3}He + \gamma$$
$$^{3}He + ^{3}He \longrightarrow ^{4}He + 2p$$

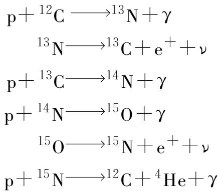


$$4p \longrightarrow ^{4}He + 2e^{+} + 2\nu + 26.2\,MeV$$

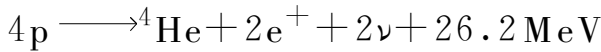
对于中心温度低于 $18\times10^{6}K$ 的恒星，其能量主要来源于质子-质子循环。太阳中心温度为 $15\times10^{6}K$，质子-质子循环所产生的能量约占总能量的 96%。

碳-氮循环　carbon-nitrogen cycle　有碳、氮

参与的四个质子聚变结合成一个^4He的反应过程。它也是恒星中存在的聚变过程之一。具体反应过程为



$$p+{}^{12}C\longrightarrow{}^{13}N+\gamma$$
$${}^{13}N\longrightarrow{}^{13}C+e^{+}+\nu$$
$$p+{}^{13}C\longrightarrow{}^{14}N+\gamma$$
$$p+{}^{14}N\longrightarrow{}^{15}O+\gamma$$
$${}^{15}O\longrightarrow{}^{15}N+e^{+}+\nu$$
$$p+{}^{15}N\longrightarrow{}^{12}C+{}^{4}He+\gamma$$



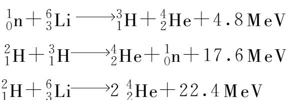
$$4p\longrightarrow{}^{4}He+2e^{+}+2\nu+26.2\,MeV$$

对于中心温度高于18×10^6K的恒星，其能量主要来源于碳-氮循环。在碳-氮循环中，碳、氮等元素是不损失的，只起催化剂作用。

热核反应　thermonuclear reaction　在超高温下轻原子核聚变成较重原子核的过程。根据理论推算，为使氘核(^2_1H)和氚核(^3_1H)产生持续的热核反应，需要维持几千万度的超高温。在这样的超高温下，气体原子完全可以电离而形成等离子体。因此，将上亿度的等离子体压缩在一定区域内，维持一段时间，使其中轻核产生聚变反应，称为热核反应。自然界中只有在太阳等恒星内部才具有热核反应所需的温度，自持进行热核反应。氢弹爆炸是一种人工热核反应。

等离子体　plasma　由大量的正离子和等量的电子组成的集合体。它已不是一般的气体、液体和固体，而是物质的第四态。

氢弹　hydrogen bomb　利用氘和氚的聚变反应而发生爆炸的装置，它是一种不可控热核反应。在通常情况下，氘和氚均为气体，不能直接用作热核燃料。氢弹所用的热核燃料多半是固态锂化氘。氢弹用原子弹引爆，小型原子弹爆炸时，一方面提供聚变反应所需的高温，另方面还产生大量中子，这些中子与锂反应产生氚，氘和氚进行热核反应。



$${}^{1}_{0}n+{}^{6}_{3}Li\longrightarrow{}^{3}_{1}H+{}^{4}_{2}He+4.8\,MeV$$
$${}^{2}_{1}H+{}^{3}_{1}H\longrightarrow{}^{4}_{2}He+{}^{1}_{0}n+17.6\,MeV$$
$${}^{2}_{1}H+{}^{6}_{3}Li\longrightarrow2\,{}^{4}_{2}He+22.4\,MeV$$

氢弹爆炸可产生更大的能量。原子弹爆炸威力一般在几万吨TNT当量，而氢弹爆炸可达到百万吨至千万吨TNT当量。

受控热核反应　controlled thermonuclear reaction　在人类控制下进行的热核反应。其目的是巨大的热核反应能量不是以爆炸的形式释放，而是要逐渐地放出来并用以发电。要实现受控热核反应，首先要把氘、氚等热核燃料加热到甚高温，使它们成为等离子体而发生聚变反应。加热的方法有欧姆加热、等离子体压缩和激光引爆加热等离子体。其次要使聚变反应自持下去并能加以控制以提供可用的能量，必须使热核反应释放的能量足以补偿形成聚变过程中所损失的能量，即达到所谓“点火”条件。

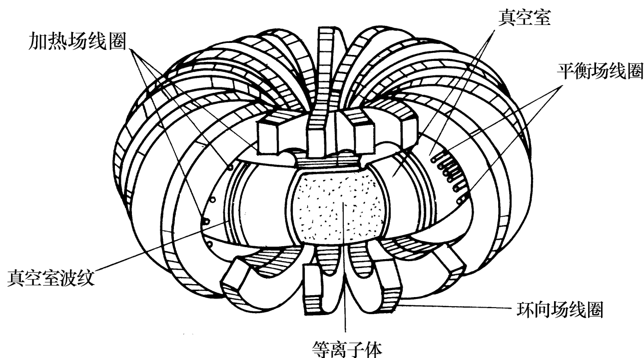
欧姆加热　Ohm heating　在等离子体中通以强大电流，产生焦耳热使等离子体温度升高的方法，是研究受控热核反应的重要实验手段之一。

磁约束　magnetic confinement　利用磁场和运动带电粒子的作用，使高温等离子体在一定密度下维持一段时间，以实现受控热核反应的一种方法。根据磁流体力学，对于磁力线处处平行的情况，$p+\dfrac{\boldsymbol{B}^2}{8\pi}=$常数，式中$p$为等离子体压强，$\boldsymbol{B}$为磁感应强度。等离子体能被约束的条件$p_{外}=0$，即$p_{内}=\dfrac{1}{8\pi}(\boldsymbol{B}^2_{外}-\boldsymbol{B}^2_{内})$。可见，要使磁场能约束等离子体，内外磁压强之差必须等于等离子体压强。高温等离子体压强很高，只要使$\boldsymbol{B}_{外}$足够高就可使上述条件成立，达到约束等离子体的目的。目前，磁镜和托卡马克装置是企图利用磁约束来实现受控热核反应的装置。

磁镜　magnetic mirror　又称磁塞，用来反射等离子体中带电粒子的强磁场区。磁镜装置是研究受控热核反应的重要实验手段之一。例如，有一轴对称性的磁场，其轴线两端的磁场较强，中心处的磁场最弱，由中心向轴线两端形成一个逐渐增强的磁场梯度。最强磁场B_m与最弱磁场B_0之比为磁镜比$R=B_m/B_0$。若使角度θ_C满足关系$\theta_C=\sin^{-1}\left(\dfrac{1}{\sqrt{R}}\right)$，则等离子体中初速矢量与磁镜轴交角小于$\theta_C$的粒子将不被磁场反射而逸出磁镜，若交角大于$\theta_C$的粒子将被磁场反射而返回弱磁场区从而被

约束在磁镜装置中。这种等离子体约束在磁镜中使其加热，温度可达 1.3×10^9K，但约束时间还太短。

托卡马克装置 Tokamak device 它是一种利用磁约束的环状大电流的箍缩等离子体装置(如图)。它的温度已达 2000 万度，约束时间较长，实现受控热核反应的希望最大，目前世界各国都在进行研究。它的主机主要由真空室、环向场线圈、加热场线圈和平衡场线圈构成。先将真空室抽空到 $10^{-8}\sim10^{-9}$mmHg 左右，然后充入 $10^{-2}\sim10^{-3}$mmHg 的氘或氢，加热场线圈输入脉冲电流时，真空室内感生放电使气体电离成等离子体使温度升高，环向场线圈产生的磁场约束等离子体，平衡场线圈产生的平衡场以防止等离子体因放电而造成的向外侧漂移。



托卡马克装置示意图

惯性约束 inertially confinement 利用从四面八方来的激光束或相对论电子束或重离子束，在极短时间内，同时射向一个微小氘氚球形靶丸，使其加热、压缩并产生热核反应的一种方法。

激光核聚变 laser nuclear fusion 一个含有聚变物质的小丸受到大功率激光四面八方的照射，小丸的外层突然加热，发生膨胀后挤压内层材料而将聚变物质高度压缩甚至使小丸直径缩小 20 多倍，从而使受压区的温度升高到足以引起聚变反应。目前激光核聚变还在试验阶段。

六、中子物理
Neutron Physics

中子源 neutron source 能发射中子的装置或物质，称为中子源。除少数重原子核自发裂变放出中子外，大量中子均被束缚在原子核内。为获得自由中子，必须用人工方法给原子核一定能量使中子从原子核内释放出来，必须给予的最低能量即为中子在该原子核内的结合能。中子在不同原子核内的结合能是不同的，约为 1.7MeV～20MeV 之间。最常用的中子源有同位素中子源、反应堆中子源和加速器中子源。

同位素中子源，是利用放射性同位素衰变时放出一定能量的射线去轰击某些靶物质，发生核反应而放出中子的装置。通常又分为由重同位素 α 放射体和适当靶物质组成的(α，n)中子源及光中子源(γ，n)。其优点是体积小，制备简单，使用方便。缺点是强度不高，能谱比较复杂。

反应堆中子源，是利用重核裂变，在反应堆内形成链式反应产生中子的一种中子源。特点是中子通量大，中子能谱比较复杂。

加速器中子源，是利用粒子加速器加速的带电粒子(如 p、d、α 等)去轰击靶物质以产生中子的装置。其特点是中子强度高，能在广阔能

区内产生单能中子或脉冲中子,便于进行各种中子物理实验。

同位素中子源 isotope neutron source 见“中子源”。

反应堆中子源 reactor neutron source 见“中子源”。

加速器中子源 accelerator neutron source 见“中子源”。

快中子 fast neutron 动能大于某特定值的中子,在核物理中选该能量值为 0.5MeV,而在反应堆物理中选该能量值为 0.1MeV。其中动能大于 100MeV 的中子称为高能中子。一般中子源初始发射出来的中子的能量多数在 MeV 量级,即多数为快中子。快中子是研究原子核性质的有力工具。

中能中子 intermediate neutron 动能介于快中子和慢中子之间的中子。

慢中子 slow neutron 动能低于某特定值的中子,在核物理中选该能量值为 1keV,而在反应堆物理中选该能量值为 1eV,其中动能约为 0.025eV 左右的中子称为热中子。

热中子 thermal neutron 动能约为 0.025eV 左右的中子。它与绝对温度 290K 的介质处于热平衡状态,其速度分布接近麦克斯韦速度分布,相应的中子波长约 1.8Å。热中子的能量与通常温度下的原子分子能量相当,其波长与原子分子的大小及它们在固体液体中的间距相近,使热中子散射成为研究物质静态和动态的有力工具。

中子发生器 neutron generator 也称中子加速器,它是利用直流高压、加速离子的能量在 1MeV 以下,利用(d,n)反应获得中子的小型加速器。实验室中所用的中子发生器主要由一高压装置和加速管组成。先加热重氢气体使之通过离子源形成一束带电粒子,加速至数十万电子伏的能量后使其聚焦并轰击加速管内氚靶,发生(d,n)核反应 ${}_1^2H + {}_1^3H \longrightarrow {}_2^4He + {}_0^1n$,所产生的中子具有高达 14.7MeV 能量,此高能中子束可供核物理实验用。

中子遏止 stopping of neutron 由于中子不带电,中子通过物质时不与原子的束缚电子或原子核的库仑场作用而产生电离。中子与物质的作用通常为与原子核的弹性散射、非弹性散射和核反应。在这些过程中,中子逐渐失去能量而被遏止。例如,利用石蜡等含氢量大的物质,可使高速中子因弹性散射而减速。又如利用 ${}^6Li$ 或 ${}^{10}B$ 等与中子核反应截面大的物质,可使中子能量因核反应而转换为带电粒子的能量,中子本身则被物质所吸收。

宏观截面 macroscopic cross-section 对应于某特定过程某单位体积给定物质的截面。对于一种核素,宏观截面 Σ 为其微观截面 σ 与单位体积内靶核数 N 的乘积 $\Sigma = N\sigma$。这里指的微观截面 σ 即为入射粒子与靶核的反应截面。所以,宏观截面的意义是入射粒子穿过靶物质单位路程上与靶物质作用而发生某种特定过程的概率。若用 σ_t、σ_a、σ_s 分别表示微观总截面、微观吸收截面和微观散射截面,则 $\Sigma_t = N\sigma_t$, $\Sigma_a = N\sigma_a$, $\Sigma_s = N\sigma_s$ 分别表示宏观总截面,宏观吸收截面和宏观散射截面。

中子平均自由程 mean free path of neutron 自由中子在介质中运动时,不断与介质中原子核作用发生散射或吸收,中子在连续两次作用之间所走过的距离的平均值,称为中子平均自由程。设一强度为 I 的平行单能中子束,射入每立方厘米含有 N 个原子的物质中,则在单位时间内在 $\mathrm{d}x$ 长度上发生散射或吸收作用的数目可表示为 $-\mathrm{d}I = IN\cdot\sigma\mathrm{d}x = I\Sigma\mathrm{d}x$,其中 $\Sigma = N\sigma$ 为宏观截面,因此得 $I = I_0 e^{-\Sigma x}$,式中 I_0 为 $x=0$ 处的中子束强度。于是,中子平均自由程为 $\lambda = \int_0^\infty x(-\mathrm{d}I)/I_0 = 1/\Sigma$(厘米)。这样,散射作用的平均自由程 $\lambda_s = 1/\Sigma_s$,吸收作用的平均自由程 $\lambda_a = 1/\Sigma_a$。

中子的慢化 slowing-down of neutron 能量高的快中子,经与轻元素物质(氢、氘和石墨等)发生弹性碰撞,其能量减低而变为热中子的过程。在每次碰撞中,动能为 E_0 的中子所损失的动能为 $\Delta E = \frac{E}{2}(1-a)(1-\cos\theta_C)$,式中 $a = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$,$A$ 为靶核质量数,θ_C 为质心系中中子的散射角。在 0～π 角度范围

内每次碰撞的平均动能损失 $\overline{\Delta E}=\frac{E}{2}(1-a)$。若中子的初动能为 E_0，要求慢化到动能 E_f，则所需的平均碰撞次数 $N=\varepsilon^{-1}\ln\frac{E_0}{E_f}$，式中 ε 为碰撞的平均对数能量损失，即 $\varepsilon=\left\langle\ln\frac{E_1}{E_2}\right\rangle=1+\frac{(A-1)^2}{2A}\ln\left(\frac{A-1}{A+1}\right)$，式中 E_1、E_2 为一次碰撞前后中子的能量值。如果用氢作慢化剂，$A=1$，$a=0$，$\varepsilon=1$，取 $E_0=2\text{MeV}$，$E_f=0.025\text{eV}$，则 $N=18.2$，这表明 2MeV 的快中子在氢中平均经过 18 次碰撞就可慢化为热中子。如用石墨和 ^{238}U，则可算出相应的 N 为 115 和 2172。

平均对数能量损失 average logarithmic energy decrement 见"中子的慢化"。

慢化本领 slowing-down power 某介质对中子的宏观散射截面 Σ_s 与中子平均对数能量损失 ε 的乘积 $\Sigma_s\varepsilon$。由于 Σ_s 为中子散射平均自由程 λ_s 的倒数，所以 $\varepsilon\Sigma_s$ 越大，中子在同样平均对数能量损失下所经过的路程就越短，这表明该介质减速能力强。因此，在设计热中子反应堆时，总是选择慢化本领较大的介质作为慢化剂。常用的慢化剂有水、重水、石墨和铍。

慢化比 moderating ratio 又称减速比，它是慢化剂的慢化本领 $\varepsilon\Sigma_s$ 与其热中子的宏观吸收截面 Σ_a 之比，$\eta=\varepsilon\Sigma_s/\Sigma_a$。由于慢化剂不仅散射中子而且也吸收中子，慢化比是衡量吸收对慢化过程的影响。η 越大，Σ_a 越小，说明慢化剂的质量越好。例如，重水的 $\eta=5670$，而水的 $\eta=71$。

费米年龄 Fermi age 对于无限大介质中的单能点中子源，用费米年龄理论算出中子从初始能量 E_0 慢化到 E_f 过程中穿行距离的方均值 $\overline{R^2}=6\tau$，τ 称为费米年龄，具有面积量纲。如果中子的散射平均自由程 λ_s 与能量无关，则 $\tau=\frac{\lambda_s^2}{3\varepsilon(1-2/3A)}\ln\frac{E_0}{E_f}$。τ 的平方根值称为慢化长度 $L_m=\sqrt{\tau}$。

慢化长度 slowing-down length 见"费米年龄"。

中子扩散 neutron diffusion 快中子慢化为热中子后，若介质宏观散射截面 Σ_s 远大于宏观吸收截面 Σ_a，则热中子并不马上消失，而是和介质中的原子核不断碰撞，交换能量，其效果就是中子从密度大的地方向密度小的地方迁移，这过程称为中子扩散。设 n 为中子密度，v 为中子的平均速度，$\Sigma_a vn$ 表示单位时间在单位体积内吸收的中子数，s 为中子源在单位时间单位体积内产生的中子数，则中子的稳态扩散方程

$$D\nabla^2 n-\Sigma_a vn+s=0$$

式中 D 为中子的扩散系数，$D=\frac{v\lambda_s}{3(1-2/3A)}$，其中 λ_s 为中子的散射平均自由程。

扩散系数 diffusion coefficient 见"中子扩散"。

扩散长度 diffusion length 由扩散方程得知，$D/\Sigma_a v$ 具有面积量纲，定义 $L=\sqrt{D/\Sigma_a v}$ 为扩散长度，它表示在无限大热中子场中热中子从产生到被物质吸收所行距离平均值。

中子波长 neutron wave length 中子具有波粒二象性，相应的德布罗意波长即为中子波长。设 m、p、E 分别为中子的质量、动量和能量，则中子波长 $\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2mE}}$。若 E 用 eV 作单位，λ 用 Å 作单位，则 $\lambda=\frac{0.286}{\sqrt{E}}$Å。中子能量越低，中子波长越长。对于热中子，$E=0.025\text{eV}$，相应的中子波长 $\lambda=1.8088$Å，它正好与原子线度或晶格间距有相同的数量级。

中子衍射 neutron diffraction 中子波长相当于普通 X 射线波长，与晶格间距有相同的数量级，所以当中子射到晶体上时将发生衍射，称为中子衍射。中子衍射有重要应用。利用中子衍射，可制成晶体单色器；选取铁磁晶体，通过相干衍射可以有效地得到极化中子束；由于中子具有磁矩，它能与固体物质中的磁性电子相互作用产生磁散射，从而测出物质的磁矩；利用中子衍射，还可方便地鉴定氢或其他轻元素在分子群中的结构。中子的衍射现象

通常是用中子衍射谱仪观测的。

中子衍射谱仪 neutron diffractometer 观测中子衍射现象的仪器，通常由中子源、晶体单色器、转动样品台和中子记录系统等几部分组成。例如，反应堆中子源产生的中子流，首先被引到置于包着铅层的含硼石蜡室中的晶体单色器上，衍射后的单能中子沿着准直管道引出，射到转动台上的样品上，再由 BF_3 正比计数器计数，测出衍射图形。通过对衍射图形的分析，即可得到有关样品结构的知识。

中子探测器 neutron detector 由于中子不带电，中子的探测都需间接进行，即探测中子与物质发生核反应后产生的次级带电粒子。一类核反应是探测核反应时立即放出的带电粒子，例如 $^{10}B(n,\alpha)^{7}Li$，$^{3}He(n,p)^{3}H$，或中子-质子散射。另一类核反应是先由中子与物质发生核反应而成为放射性物质，然后移出放射性物质并测其放射性（β 或 γ 射线）。常用的中子探测器有硼计数器、质子反冲探测器、中子飞行时间能谱仪和裂变计数器等。

硼计数器 boron counter 用硼的同位素 ^{10}B 与中子引起核反应而制成的一种中子探测器。在一圆筒形容器中装入含浓缩 ^{10}B（达 96%）氟化硼（BF_3）低压气体，其中心为金属细丝阴极。当中子射入时与 ^{10}B 发生核反应（n，α），$^{1}_{0}n + ^{10}_{5}B \longrightarrow ^{7}_{3}Li + ^{4}_{2}He$，所产生的 α 粒子具有一定的动能，立即引起电离并产生离子偶，其作用与一般充气计数器相同。为了更有效地探测快中子，硼计数器周围包以石蜡，先使快中子慢化为热中子，因为热中子与 ^{10}B 的反应截面较大。

质子反冲探测器 proton-recoil detector 利用反冲质子探测中子的一种中子探测器。一个能量为 E 的中子与静止质子碰撞，质子获得的能量为 $E_p = E\cos^2\theta$，式中 θ 为反冲质子的飞行方向与入射中子方向间夹角。此式表明，测出反冲质子的最大能量 $(E_p)_{max} = E$，即为入射中子的能量。中子能量适合测量范围为 10keV～10MeV。在质子反冲探测器中充有氢气或甲烷，压强可为数个大气压。目前质子反冲闪烁计数器已被广泛用作快中子探测器。

裂变计数器 fission counter 利用中子引起的核裂变的裂变产物探测中子的一种中子探测器。核裂变产物的能量可达 160 MeV。这种探测器在探测反应堆内的中子时尤为重要。

中子飞行时间能谱仪 neutron time of flight spectrometer 利用测量粒子在一定距离间所飞行的时间来确定粒子动能的谱仪。它能测量自慢中子至快中子范围内的中子能量。这种谱仪主要包括脉冲中子源、飞行路程导管及某种中子探测器（如 BF_3 计数器）。设中子源与探测器的距离为 L，则能量为 E 的中子到达探测器的飞行时间 $t = \frac{L}{v} = L(m/2E)^{1/2}$。若中子能量 E 以 eV 为单位，L 以 m 为单位，t 以 μs 为单位，则 $t = \frac{72.3L}{\sqrt{E}}$μs。由于 L 一定，故测出探测到中子脉冲和产生此脉冲的时间差，即可求得中子能量 E。显然，中子源产生的中子脉冲宽度必须小于飞行时间。

中子弹 neutron bomb 一种经过特殊设计、既减弱了核爆炸时冲击波和热辐射的破坏作用、又加强了有高度穿透能力的中子辐射杀伤作用的小型武器。中子弹的体积不大，它可以由导弹或榴弹炮发射。它对人员的杀伤主要是将其具有高穿透力的早期核辐射（特别能量为 10～20MeV 的中子）以致死或致残的剂量照射到人身上，但其剩余核辐射却比一般原子弹或氢弹要弱。

Particle Physics
粒子物理学

粒子物理学 particle physics 粒子物理是研究粒子的性质、结构和相互作用的学科。随着研究的深入增多，粒子物理研究的内容也在深化。

一、粒子的特性和分类
Characteristics and Classification of Particles

基本粒子 elementary particle 原意是物质存在的基本单元。1932年发现中子时，认为基本粒子只是组成原子的三种粒子：电子、质子和中子。后来实验发现了几百种基本粒子（包括大量的寿命短至10^{-22}秒的共振态粒子）。按照参与相互作用性质的不同，基本粒子可分为三类：

光子——只参与电磁作用；

轻子——既参与电磁作用，又参与弱作用；

强子——既参与电磁作用和弱作用，又参与强作用。常见的基本粒子分类见下页表。

基本粒子的概念是随着人们对物质结构认识的进展而不断发展的，现已认识到不能把它看成是物质最后的、最简单的组成单元。在已经发现的基本粒子中绝大部分是强子，已经证实所有强子都是夸克组成的束缚态。这表明强子是有内部结构，因而大家倾向于不再用“基本粒子”这个名称，而改称为“粒子”。

按照目前的认识，组成强子的夸克（而不是强子本身）、轻子和媒介子属于物质结构的同一层次，它们可称为现阶段的“基本粒子”，见下表。

夸克	u	d	c	s	t	b
轻子	ν_e	e	ν_μ	μ	ν_τ	τ
媒介子	光子，中间矢量玻色子，胶子					

由于光子、中间矢量玻色子和胶子是传递相互作用的粒子，所以被称为媒介子。

宇宙射线 cosmic ray 从宇宙空间射向地面的高能粒子流，其中包括各种类型的粒子和某些原子核。在大气层和地面观察到的宇宙射线，不仅包括来自宇宙空间的初级宇宙射线，而且还包括与大气层中的原子核反应后形成的次级宇宙射线。宇宙射线的特点是：能量高、强度弱、成分复杂。目前观察到宇宙粒子最高能量为10^{15}MeV量级，比人工加速粒子能量（10^6MeV）大10^9倍。因此，宇宙射线是目前研究粒子的惟一高能粒子源。

初级宇宙射线 primitive cosmic ray 由宇宙空间来到地球大气层边缘的宇宙射线称为初级宇宙射线。它是一种带电荷的粒子流，其中绝大部分是质子，其次是α粒子，还有其他较重元素的原子核。这些粒子的能量小的约为10^3MeV，个别的可高达10^{15}MeV。实验表明，初级宇宙射线是从各方向均匀地射到地球上来的，它在大气层边缘处的强度约为1个/厘米^2·秒，这一强度随太阳的活动情况而周期性变化。由于初级宇宙射线在大气层的上层就与空气的原子核相碰撞而产生次级粒子，因而在低于15公里的高空中，初级宇宙射线已绝大部分转变为次级宇宙射线。

次级宇宙射线 secondary cosmic ray 由初级宇宙射线与大气层中空气的原子核相互作用而产生的次级粒子流称为次级宇宙射线。由于这些次级粒子能量很高，足以引起新的核作用，产生新的次级粒子。新的次级粒子又可引起第三次核作用，这样形成级联核作用。同时，次级粒子衰变而得到的γ光子，在空气的原子核附近通过电磁相互作用产生正负电子对，这些正负电子对又能产生新的高能γ光子，从而形成了光子-电子簇射。由于这样一个复杂的过程，使得宇宙射线的成分随高度发生变化。在大气层的表面层中宇宙线的主要成分是核子；在高度为5～17公里的大气层中

基本粒子分类表

分类名称			符号	静止质量(犕犲犞)	自旋宇称犑犘	同位旋犐	同位旋分量犐3	奇异数犛	电荷犙	平均寿命
光子			γ	0	1^{-}	0	0	0	0	稳定
轻子	电子		犲	0.511	1/2				−1	稳定
	电子型中微子		$\nu_{犲}$	0					0	
	μ子		μ^{-}	105.659	1/2				−1	2.197×10^{-6}昊
	μ子型中微子		ν_{μ}	0（<0.57）					0	稳定
	τ子		τ^{-}	1777	1/2				−1	$\leqslant10^{-12}$昊
	τ子型中微子		ν_{τ}	0（<250）					0	
强子	介子	π介子	π^{+}	139.567	0^{-}	1	+1	0	+1	2.603×10^{-8}昊
			π^{0}	134.963	0^{-}	1	0	0	0	0.828×10^{-16}昊
			π^{-}	139.567	0^{-}	1	−1	0	−1	2.603×10^{-8}昊
		犓介子	$犓^{+}$	493.668	0^{-}	1/2	+1/2	+1	+1	1.2371×10^{-8}昊
			$犓^{-}$				−1/2	−1	−1	
			$\overline{犓}^{0}$	497.67	0^{-}	1/2	+1/2	−1	0	
			$犓^{0}$				−1/2	+1		
			$犓^{0}_{犛}$		0^{-}	1/2			0	8.892×10^{-10}昊
			$犓^{0}_{犔}$							5.183×10^{-8}昊
		η介子	η	548.8	0^{-}	0	0	0	0	Γ=0.88犽犲犞

强子	介子	新粒子	粿/ψ	3097	1^-	0	0	0	0	Γ=67犽犲犞
			$犇^+$ $\overline{犇}^-$	1868.3	0^-	1/2	+1/2 −1/2	0	+1 −1	~10^{-12}狊
			$犇^0$ $\overline{犇}^0$	1868.3	0^-	1/2	+1/2 −1/2	0	0	~10^{-12}狊
			$犉^+$ $犉^-$	~2030	0^-	0	0	−1 +1	+1 −1	
			Υ	~9500	1^-	0	0	0	0	
	重子	核子	狆 狀	938.2796 939.5731	$1/2^+$ $1/2^+$	1/2	+1/2 −1/2	0	+1 0	稳定 918±14狊
		超子	Λ	1115.60	$1/2^+$	0	0	−1	0	2.632×10^{-10}狊
			Σ^+ Σ^0 Σ^-	1189.37 1192.47 1197.35	$1/2^+$	1	+1 0 −1	−1	+1 0 −1	0.8×10^{-10}狊 5.8×10^{-20}狊 1.48×10^{-10}狊
			Ξ^0 Ξ^-	1314.9 1321.32	$1/2^+$	1/2	−1/2 +1/2	−2	0 −1	2.90×10^{-10}狊 1.654×10^{-10}狊
			Ω^-	1672.45	$3/2^+$	0	0	−3	−1	$1.1+0.3\times10^{-10}$狊 $1.1-0.3\times10^{-10}$狊

宇宙线的主要成分是正负电子和光子;在大气层的下层直至地下,宇宙线的主要成分是次级粒子衰变产生的高能 μ 子。在海平面附近,次级宇宙射线的强度已降为 1 个/厘米^2·分左右,这个强度基本上不受太阳活动的影响。

广延簇射 extensive shower 又称广延大气簇射,它是由宇宙线中能量极高($\geqslant 10^7$MeV)的质子或其他原子核,在通过大气层时,与大气中的原子核碰撞而产生的一种级联过程。其中主要是核级联过程(强作用)和电子-光子簇射过程(电磁相互作用)以及级联过程中产生的不稳定粒子的衰变(主要是弱作用)。这种过程在很短的时间内"雪崩"式地发展完成,最后到达地面时,已形成大量的次级粒子。其中,主要是电子和少量的 μ 子、质子及其他粒子,多者可达几百万个,分布在几平方公里到几十平方公里的范围内。

费米子 fermion 自旋为半整数的粒子统称为费米子。费米子受泡利不相容原理的制约,即不能有两个或两个以上的全同费米子出现在同一量子态中。轻子、核子和超子的自旋均为 1/2,有些共振态粒子的自旋为 3/2、5/2、7/2,它们都是费米子。

玻色子 boson 自旋为整数(包括零)的粒子统称为玻色子。玻色子不受泡利原理的限制,即可以有任意多个玻色子处在同一量子态中。费米子以外的所有粒子都是玻色子,如光子、介子、胶子以及假设的引力子等都是玻色子。

反粒子 antiparticle 1928 年狄拉克预测电子有反粒子存在,1932 年安德森在宇宙线中发现电子的反粒子——正电子。现在狄拉克理论已经推广到所有粒子,每种粒子都有它的反粒子。反粒子和它对应的粒子具有相同的质量、自旋和平均寿命,但是电荷、磁矩、重子数、轻子数、奇异数和超荷都等量而异号。至于宇称,费米子和反费米子宇称相反,而玻色子和反玻色子宇称相同。对于光子、π^0介子和 η^0介子等粒子,由于区分粒子和反粒子的上述量子数都为零。因而这些粒子自身就是它们的反粒子,称为真中性粒子。每一种粒子与其反粒子相碰会转变为光子(或介子),称为粒子-反粒子对的"湮没"。一个能量很大的光子在经过原子核附近的电磁场时,往往会产生一对电子和正电子,称为粒子-反粒子对的产生。质子的反粒子称为反质子,中子的反粒子称为反中子。反粒子的记法一般是在粒子的符号上加一短划,例如反质子 $\bar{p}$,反中子 $\bar{n}$,反电子型中微子 $\bar{\nu}_e$,反 Ω^-超子 $\bar{\Omega}^-$等。某些科学家根据反粒子存在的事实,设想在宇宙的某些部分可能存在一种完全由反粒子构成的物质,称为反物质。例如,反物质的原子是由反原子核(反质子和反中子的集合体)及核外运动的正电子构成。最近几年,利用高能加速器先后在核反应中制造出反氘核和反氦核,也制造出了反氢原子。

反质子 antiproton 质子的反粒子,用符号 $\bar{p}$ 表示,带负电荷,是 1955 年发现的。反质子和质子相碰可湮没为 π 介子。高能反质子与质子相碰还可产生大量的各种强子,见"反粒子"。

反中子 antineutron 中子的反粒子,用符号 $\bar{n}$ 表示,其磁矩对其自旋是同号的,是 1956 年发现的。反中子与中子相碰可湮没为 π 介子。见"反粒子"。

反物质 antimatter 见"反粒子"。

粒子-反粒子对产生 particle-antiparticle Pair production 见"反粒子"。

粒子-反粒子对湮没 particle-antiparticle Pair annihilation 见"反粒子"。

强相互作用 strong interaction 原先把存在于重子、介子等强子之间的一种基本相互作用称为强相互作用。其特点是:强度大,比电磁作用大 10^3 倍,比弱作用大 10^{12}倍,其强度可用无量纲耦合常数($g^2/4\pi$)≈15 表征;力程短,大约在 10^{-15}米以内;所引起的反应迅速,特征时间为 10^{-22}秒;具有极高的对称性,在强作用过程中,除了电荷守恒和重子数守恒等普遍守恒定律之外,还有强作用所特有的一些守恒律,如奇异数守恒、同位旋守恒、超荷守恒、粲数守恒等。一般认为,强作用是通过中间粒子的交换而实现的,例如核子间的强作用(核力)是通过交换 π 介子而实现的。目前认为强作用是夸克之间的相互作用,它是通过交换色胶子场(胶子)而进行的,通常强子之间的相互作用可

归结为组成强子的夸克之间的作用。

电磁相互作用 electromagnetic interaction 有光子(包括实光子和虚光子)参与的一种相互作用,它是长程相互作用,其强度可用无量纲参量 $\alpha = e^2/\hbar c = \frac{1}{137}$ 来表征,α 称为精细结构常数。通过交换光子而实现的电磁相互作用可以引起光子和带电粒子之间的散射,两带电粒子之间的散射、带电粒子对湮没为光子以及光子产生带电粒子对等过程。由电磁作用引起的衰变称为电磁衰变,例如 $\pi^\circ \longrightarrow 2\gamma$,$\Sigma^\circ \longrightarrow \Lambda^\circ + \gamma$。

弱相互作用 weak interaction 广泛存在于轻子与轻子、轻子与强子、强子与强子之间的一种基本相互作用。其主要特点:作用强度微弱,比电磁作用弱 10^9 倍,比强作用弱 10^{12}倍,其强度可用无量纲耦合常数 $GM_P^2 = 10^{-5}$表征;作用范围小,其力程在 10^{-16}米以内;所引起的反应进行较慢,特征时间在 10^{-10}秒以上;比其他作用有较低的对称性,在弱作用中,宇称、电荷共轭宇称、同位旋等都不守恒。弱作用是通过交换中间矢量玻色子进行的。目前,电磁作用和弱作用已统一为电弱相互作用。

引力相互作用 gravitational interaction 即重力相互作用,是物质间最普遍存在的一种基本相互作用,是一种长程相互作用。在微观世界里,引力和其他三种作用比较非常微弱,它比强作用弱 10^{40}倍,比电磁作用弱 10^{37}倍,比弱作用还弱 10^{28}倍。所以对基本粒子而言,引力作用是可忽略的,但其在天体、星系、宇宙结构中起重要作用。

对称性 symmetry 如果体系的运动规律在某种对称变换下具有不变性,则称该体系具有这种对称性。用连续变换的不变性表示时空对称性,用分立变换的不变性表示空间反射对称性等。除普通时间空间外,还有内部空间,存在内部空间的对称性,例如同位旋空间对称性、味空间对称性和色空间对称性等。

守恒定律 conservation law 经典力学关于对称性和守恒定律之间关系的研究得出诺特定理:如果某体系的运动规律在某种对称变换下具有不变性,则必然存在着一种对应的守恒定律。这一定理对量子理论也同样适用。守恒定律相应的物理量,称为守恒量,它不随时间而变化。例如空间平移不变性相应于动量守恒,时间平移不变性相应于能量守恒,空间转动不变性相应于角动量守恒,空间反射变换不变性相应于宇称守恒。对于内部变换的不变性,相应的有电荷守恒、重子数守恒、轻子数守恒等。下表列出三种相互作用下的守恒定律。用“+”表示守恒,用“−”表示不守恒。

守恒量 \ 相互作用	强作用	电磁作用	弱作用
能量(E)	+	+	+
动量($\boldsymbol{p}$)	+	+	+
角动量($\boldsymbol{J}$)	+	+	+
电荷(Q)	+	+	+
电轻子数(L_e)	+	+	+
μ 轻子数(L_μ)	+	+	+
τ 轻子数(L_τ)	+	+	+
重子数(B)	+	+	+
同位旋(I)	+	−	−
同位旋分量(I_3)	+	+	−
奇异数(S)	+	+	−
宇称(p)	+	+	−
电荷共轭(C)	+	+	−
时间反演(T)	+	+	
CPT 联合变换	+	+	+

宇称守恒 parity conservation 指一孤立体系的宇称不随时间变化,即当体系内部发生变化时,变化前体系的宇称等于变化后体系的宇称,这就是宇称守恒定律。宇称守恒定律是与微观规律对空间反射的不变性相联系,即一个微观物理过程和它的镜像过程的规律完全相同时,该微观体系的宇称是守恒的。实验表明,在强相互作用和电磁相互作用过程中,宇称是守恒的。

宇称不守恒 parity nonconservation 指一孤立体系的宇称随时间变化。1956年李政道和杨振宁通过对有关宇称守恒材料的认真分析,提出了在弱相互作用中宇称不守恒的假说,并建议可以通过实验来检验。1957年吴健雄等人做的极化原子核^{60}Co的β衰变实验,证明在β衰变中宇称是不守恒的。不久后,实验证明在介子衰变中宇称也是不守恒的,而且解开了所谓“τ-θ”之谜。结论是:在整个弱相互作用中宇称不守恒。

“τ-θ”之谜 tau-theta puzzle 指曾经在一段时间里被认为难以理解的一个实验事实,五十年代初,实验发现了分别衰变为3π和2π的粒子,当时称它们为τ粒子和θ粒子:

$$\left.\begin{array}{l}\tau \longrightarrow \pi+\pi+\pi \\ \theta \longrightarrow \pi+\pi\end{array}\right\} \qquad (1)$$

τ和θ是两种不同粒子,还是同一种粒子的两种衰变方式,还不能下结论。如果根据宇称守恒定律分析,τ粒子和θ粒子分别具有奇宇称和偶宇称,这表明τ和θ为两种不同的粒子。但实验测得τ和θ的质量分别为

$$(966.3\pm2.0)\,m_e \text{和} (966.7\pm2.0)\,m_e$$

寿命分别为

$$(1.19\pm0.05)\times10^{-8}\text{s 和}$$
$$(1.21\pm0.02)\times10^{-8}\text{s。}$$

可见,在实验误差范围内,两者的质量和寿命都相同,这表明τ和θ是同一种粒子。这就出现了矛盾。这一矛盾称为τ-θ之谜。现在认识到,τ和θ粒子实际上为同一种粒子K介子。根据弱相互作用下宇称不守恒,可以解释(1)是K介子的两种不同衰变方式。

$$K \longrightarrow \pi+\pi+\pi$$
$$K \longrightarrow \pi+\pi$$

于是τ-θ之谜不再存在。

电荷共轭 charge conjugation 又称粒子-反粒子变换,是指把一个体系的粒子都换成其反粒子,而把所有的反粒子都换成其对应粒子的变换。在此变换中,电荷Q、重子数B、轻子数L、奇异数S、超荷Y,同位旋分量I_3等相加性量子数都改变其符号。因此,凡具有这一类相加性量子数的粒子,在电荷共轭变换下都要变成自己的反粒子,因而它们都不是电荷共轭变换的本征态。

电荷宇称(C宇称) charge parity(C-parity) 对真中性粒子(如γ、π^0等),它们的相加性量子数Q、B、L、S、Y和I_3等都为零,它们的波函数在电荷共轭变换下或者保持符号不变(如π^0)或者改变符号(如γ)。这些真中性粒子具有一个确定的量子数C,称为电荷宇称。在不变号的情况下称该粒子的C宇称为$C=+1$,在变号的情况下,$C=-1$。电荷宇称$C=\pm1$是两个相乘性量子数。附表列出几种粒子的C宇称。

粒子	γ	π^0	η	ρ^0	ω	J/ψ
C	-1	$+1$	$+1$	-1	-1	-1

实验表明,电荷宇称守恒定律在强作用和电磁作用过程中成立,而在弱作用过程中不成立。例如,根据电荷宇称守恒定律,具有奇数光子和偶数光子的状态之间不能通电磁作用而相互转化。

G共轭和G宇称 G-conjugation and G-parity G共轭是与非奇异介子有关的一种变换,是电荷共轭C和绕同位旋第二轴转180°的变换$e^{i\pi I_2}$的结合$G=Ce^{i\pi I_2}$。由于强作用对于电荷共轭和同位旋空间转动都具有不变性,因而强作用对G共轭也具有不变性。C变换的本征态仅为中性粒子,而G变换的本征态不仅有中性粒子,还包含有带电粒子。可以证明,G变换的本征值$G=(-1)^I C$,称为G宇称,是一种相乘性量子数,式中I为粒子的同位旋。由于$C=\pm1$,I为整数,所以$G=\pm1$。由于强作用过程中G宇称守恒,因而具有奇数个π介子的状态和具有偶数个π介子的状态之间,不能通常强作用而相互转化。

时间反演 time inversion 时间反演对称性就是可逆性问题。时间反演是把时间的流向倒转过来,即t换成$-t$的变换。宏观现象在时间上是不可逆的,而微观过程的基本规律却是可逆的。形象地说,就是把一个物理过程拍成电影,然后把胶卷倒过来放映,而这些在倒放映的影片中出现的情形,仍旧是现实世界中可以发生的过程。这一表述称为时间反演守

恒定律。

CPT 定理 CPT theorem 用 P、T、C 分别表示空间反射、时间反演和电荷共轭变换。在强作用和电磁作用中，P、T 或 C 中任一变换下都是不变的。量子场论可以证明，符合相对论的基本粒子理论在 CPT 联合变换下总是不变的。这表明，P、T、C 三个守恒定律任两个成立，便得证第三个也成立。这种关系称为 CPT 定理。在弱作用如 β 衰变过程中，T 变换守恒，按 CPT 定理，CP 联合变换也守恒（在弱作用中，P 变换或 C 变换分别是不守恒的）。在研究 K 衰变时，CP 联合变换不完全是守恒的。因此，在弱作用中，T 变换有微小程度不守恒。

光子 photon 是光波或其他电磁辐射的量子，常用符号 γ 表示。光虽具有波动性，如干涉和衍射，但在黑体辐射和光电效应等实验中又表现为粒子性。1900 年普朗克根据黑体辐射实验，提出电磁辐射的能量必须是 $h\nu$ 的整数倍（ν 为辐射频率，h 为普朗克常数）；1905 年爱因斯坦提出光子概念，成功地解释了光电效应；1923 年康普顿根据 **X** 射线散射实验，证明光子具有能量和动量，并且在光子和自由电子碰撞过程中能量和动量守恒，从而证实光子是一种客观存在的基本粒子。量子场论认为光子是电磁场的量子，电磁相互作用是通过交换虚光子进行的，即光子是一种传递电磁作用的粒子，故又称电磁媒介子。光子是静止质量为零，自旋、宇称和电荷宇称为 $J^{PC}=1^{--}$，能量为 $h\nu$，动量为 $\frac{h\nu}{c}$，以光速 c 运动的玻色子。1970 年李政道和威克提出，有可能存在一种量子数与光子相同而静质量不为零的重光子。这种重光子场具有负度规，利用重光子场和通常的零质量光子场叠加，能够消除量子场论中的一些发散困难。据估计，重光子的质量在 $10\text{GeV}/c^2$ 以上。迄今为止，实验上还没有发现这种重光子。

重光子 heavy photon 见“光子”。

轻子 lepton 原来指质量远小于质子、只参与电磁作用和弱作用而不参与强作用的一类费米子，它包括电子和电子型中微小、μ 子和 μ 子型中微子。后来发现质量大于质子的 τ 子（重轻子）和 τ 子型中微子。这样，轻子总共有六种及其反粒子。所有轻子都带有一个守恒量子数——轻子数。

轻子数 lepton number 描述粒子性质的一种相加性量子数。按定义，电子、μ 子、τ 子和它们各自的中微子都具有轻子数 $L=+1$，上述轻子的反粒子则具有轻子数 $L=-1$；所有其他粒子的轻子数均为零。具体地说，有三种轻子数：L_e（电子轻子数）、L_μ（μ 子轻子数）和 L_τ（τ 子轻子数），其定义见下表。

轻子数 \ 粒子	e^-	e^+	ν_e	$\bar{\nu}_e$	μ^-	μ^+	ν_μ	$\bar{\nu}_\mu$	τ^-	τ^+	ν_τ	$\bar{\nu}_\tau$	其他粒子
L_e	+1	−1	+1	−1	0				0				0
L_μ	0				+1	−1	+1	−1	0				0
L_τ	0				0				+1	−1	+1	−1	0

实验表明，一切反应过程中，L_e、L_μ、L_τ 分别守恒。但不能简单地说，一切反应过程中轻子数守恒，例如 μ 子不能衰变为电子和光子 $\mu^\pm \not\longrightarrow e^\pm+\gamma$，这一过程被禁戒是由于 L_e、L_μ 均不守恒，而轻子数却是守恒的。但 μ 子可以衰变为电子（e^-）、电子型反中微子（$\bar{\nu}_e$）和 μ 子型中微子（ν_μ），$\mu^-\longrightarrow e^-+\bar{\nu}_e+\nu_\mu$。这一过程中 L_e、L_μ 分别守恒。

电子 electron 1897 年汤姆孙在研究阴极射线时发现了电子，是最早发现的一个基本粒子。它是组成稳定原子的粒子之一，是轻子的一种，用符号 e（或 e^-）表示。电子的自旋为 $\frac{1}{2}$，质量 m_e 为 9.1×10^{-31}kg（与 0.511MeV 能量相联系），带有 1.6×10^{-19}C 的负电荷。电子比强子更像是类点粒子，因而常常用高能

电子撞击强子来研究强子的形状、大小和内部结构。

正电子 positron 又称阳电子，是电子的反粒子。正电子除带正的电子电荷外，其质量、自旋均与电子一样，常用符号 e^+ 表示。1928 年狄拉克根据相对论量子力学预言有正电子存在，它是相对论波动方程相应于负能态的解。1932 年安德森在宇宙线中发现了正电子。当高能 γ 光子的能量超过 1.02MeV 时，就可导致电子正电子对产生 $\gamma \longrightarrow e^+ + e^-$。而当正电子和电子相遇时将发生电子对的湮没，产生光子或其他粒子。

电子-正电子对产生 electron-positron pair production 又称电子对或电子偶的产生，能量超过 1.02MeV 的 γ 光子，在原子核的库仑场中有可能被吸收而产生电子-正电子对。由于电子和正电子的质量相联系的能量均为 0.51MeV，所以产生电子-正电子对至少需要 1.02MeV 的能量。如果要观察到这个现象，电子要有动能才能飞出，所以 γ 光子的能量比 1.02MeV 还要大。

γ 光子转变为电子对需服从能量和动量同时守恒。孤立的光子不能转变为电子对，因为能量和动量不能同时守恒。因此，产生电子对的 γ 光子必须在另一粒子如原子核附近，使一部分能量和动量被该原子核带走。

电子-正电子对湮没 electron-positron pair annihilation 一对正负电子相遇可以湮没而成为 γ 光子。在湮没前，一对正负电子形成短寿命类原子结构的电子偶素。在电子偶素中，两电子的自旋可能同向或反向。电子自旋同向的情形称为正电子偶素，平均寿命为 10^{-7}s，正电子偶素湮没时发出三个 γ 光子。电子自旋相反的情形称为仲电子偶素，平均寿命为 10^{-10}s，仲电子偶素湮没时发出二个 γ 光子。电子对湮没时不能只产生一个 γ 光子，因为这种过程不能同时服从能量和动量守恒。

电子偶素 positronium 见“电子-正电子对湮没”。

μ 子 muon 1937 年由安德森和尼德迈尔在宇宙线中首先发现，是轻子的一种，自旋为 $\frac{1}{2}$，带有 1.6×10^{-19}C 的负电荷，质量 $m_\mu = 207\,m_e$，用符号 μ(或 μ^-)表示。μ 子的穿透力强，不稳定(寿命约为 2.2×10^{-6}s)，μ 子的反粒子为 μ^+。当 γ 光子的能量大于 $2\,m_\mu c^2$ 时，通过电磁相互作用产生正负 μ 子对，$\gamma \longrightarrow \mu^+ + \mu^-$，高能电子对湮没也能产生 μ 子对，$e^+ + e^- \longrightarrow \mu^+ + \mu^-$。正负两种 μ 子的衰变方式为 $\mu^- \longrightarrow e^- + \bar{\nu}_e + \nu_\mu$，$\mu^+ \longrightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu$，这符合电子轻子数 L_e 和 μ 子轻子数 L_μ 分别守恒。

τ 子 tauon 又称重轻子，1975 年被发现的，是轻子的一种，自旋为 $\frac{1}{2}$，带有 1.6×10^{-19}C 的负电荷，其质量 $m_\tau = 1780\text{MeV}/c^2$，比质子质量还大，故称重轻子，用符号 τ(或 τ^-)表示，它的反粒子为 τ^+。由于 τ 子的寿命为几千亿分之一秒，它未衰变前的行程太短，难以直接观察。因此，只能通过 τ 子的衰变特性来间接识别。实验证明，在电子-正电子对撞机实验中有 τ 子和反 τ 子对产生 $e^+ + e^- \longrightarrow \tau^+ + \tau^-$。同时还有实验表明，有与 τ 子相伴的 τ 子中微子 ν_τ 和 $\bar{\nu}_\tau$ 存在，相应的有 τ 轻子数 L_τ 守恒。

中微子 neutrino 中性轻子，用符号 ν 表示。1930 年泡利在解释 β 衰变中能量和角动量“不守恒”的情形时，首先提出有一种质量近乎为零并以光速运动的中性粒子——中微子存在的假说。1933 年费米根据中微子假说发展了 β 衰变理论，认为中微子静止质量为零、不带电荷、自旋为 $\frac{1}{2}$，以光速运动时具有能量、线动量和角动量。β 衰变理论和实验符合间接证明了中微子存在。1956 年洛斯·阿拉莫斯的物理学家小组直接观察到反中微子。1956 年李政道和杨振宁提出弱相互作用中宇称不守恒后，对中微子性质进一步解释，认为有两种中微子，一种是在 β 衰变时随正电子伴生的中微子 ν_e，另一种是在 β 衰变时随负电子而伴生的反中微子 $\bar{\nu}_e$，其衰变方式为 ${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A}_{Z-1}Y + e^+ + \nu_e$，${}^A_ZX \longrightarrow {}^{A}_{Z+1}Y + e^- + \bar{\nu}_e$，式中 X 代表 β 衰变的母核，Y 为子核。反中微子 $\bar{\nu}_e$ 的自旋与其线

动量平行，称为右旋反中微子；中微子 ν_e 的自旋与其线动量反平行，称为左旋中微子。这两种中微子统称为电子型中微子。1962 年美国布鲁海文国家实验室由实验发现，π 介子衰变为 μ 子时放出的中微子与 β 衰变时放出的中微子不同，$\pi^+ \longrightarrow \mu^+ + \nu_\mu$，$\pi^- \longrightarrow \mu^- + \bar{\nu}_\mu$，式中 ν_μ 和 $\bar{\nu}_\mu$ 称为 μ 子型中微子。τ 子发现后，有实验表明，存在与 τ 子伴生的 τ 子型中微子 ν_τ 和 $\bar{\nu}_\tau$。实验上测定的中微子质量的上限，

$m(\nu_e) < 60\mathrm{eV}/c^2$，$m(\nu_\mu) < 1.2\mathrm{MeV}/c^2$；$m(\nu_\tau) < 250\mathrm{MeV}/c^2$。

电子型中微子 eleneutrino 见“中微子”。

μ 子型中微子 muneutrino 见“中微子”。

τ 子型中微子 tauneutrino 见“中微子”。

螺旋度 helicity 螺旋度的定义为 $H = \dfrac{\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{s}}{|\boldsymbol{p}||\boldsymbol{s}|}$，式中 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 分别表示粒子的动量和自旋。理论和实验表明，中微子的螺度 $H = \pm 1$。$H = +1$ 的为反中微子 $\bar{\nu}$，其自旋方向与运动方向相同，即运动方向与右手螺旋相同，称为右旋反中微子；$H = -1$ 的为中微子 ν，其自旋方向与运动反向，即运动方向与左手螺旋相同，称为左旋中微子。

中微子振荡 neutrino oscillation 中微子有三种不同的“味道”，ν_e、ν_μ 和 ν_τ。根据大统一理论，中微子应有不为零的静止质量，因而中微子可以从一种“味”变到另一种“味”，然后又变回来，称为中微子振荡。以 ν_e 和 ν_μ 振荡为例，中微子振荡 $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$。1980 年 4 月雷因斯领导的小组发现了中微子振荡的迹象。1998 年日本物理学家发现中微子的静止质量似不为零，这为中微子振荡提供了依据。

强子 hadron 参与强作用的粒子统称强子。已经发现的粒子绝大部分为强子，它包括重子和介子两大类。强子中质量比质子更重（包括质子在内）自旋为半整数的一类粒子，称为重子。重子为费米子，其反粒子称为反重子。所有重子和反重子都带有一个守恒量子数——重子数 B，重子的重子数 $B = +1$，反重子的重子数 $B = -1$。在一切反应过程中，重子数守恒。除质子外，所有其他重子，如 Λ 超子、Σ 超子、Ξ 超子、Ω 超子和中子等都是不稳定的，它们都衰变为质子。参与强作用的自旋为整数的一类粒子，称为介子。介子为玻色子，它包括 π 介子、K 介子和大量的共振态介子。有些共振态介子的质量很大，甚至大于质子质量。强子除参与强作用外，还参与电磁作用和弱作用。强子的复合特性比较明显，有一定的大小，其半径约为 10^{-15}m。

共振态 resonance 又称为共振态粒子，指不稳定的一类强子，它是某些较稳定强子的激发状态，带有强子的各种量子数，如自旋、宇称、同位旋、奇异数、粲数等。共振态粒子一般通过强作用衰变，因而寿命很短，约为 10^{-22}s 左右。由于共振态的寿命很短，难以用探测器探测。根据能量时间测不准关系，共振态粒子没有确定的能量和质量，其能量不确定程度为能级宽度 Γ，它与粒子寿命 τ 之间的关系为 $\Gamma = \hbar/\tau$。由实验测定其能级宽度 Γ，从而算出其寿命 τ。最早发现的共振态粒子为 Δ 粒子，它的自旋和同位旋均为 $\dfrac{3}{2}$，称为 3－3 共振态。共振态粒子可分为两类，一类为重子共振态，均为费米子；另一类为介子共振态，均为玻色子。

重子 baryon 见“强子”。

重子数 baryon number 粒子所具有的一个相加性量子数，常用符号 B 表示。规定，一切重子的重子数 $B = +1$，一切反重子的重子数 $B = -1$；介子、轻子和光子的重子数 $B = 0$。实验证明，一切反应过程中重子数守恒。由于核物质是质子和中子（均为重子）组成，核物质具有高度稳定性，说明重子数守恒是一条严格的自然规律。

奇异粒子 strange particle 强子中包括 K 介子和超子（Λ、Σ、Ξ、Ω）在内的一类粒子。这些粒子具有奇怪的特点：(1) 这些粒子的产生过程非常迅速而强烈（约 10^{-24}s），是强作用引起的，而衰变过程却是缓慢的弱作用（平均寿命约为 $10^{-8} \sim 10^{-10}$s）；(2) 这些粒子总是成对地产生（协同产生），似乎受到某种条件的约束。为了解释奇异粒子的行为，1954 年盖尔曼和西岛等人引入一种新的相加性量子数——奇异数 S，凡是非奇异粒子规定 $S = 0$，而奇异

粒子的奇异数 S 规定如下：

S	3	2	1	−1	−2	−3
粒子	$\overline{\Omega}^-$	$\overline{\Xi}^-$　$\overline{\Theta}^0$	K^+　K^0　$\overline{\Lambda}^0$　$\overline{\Sigma}^-\overline{\Sigma}^0\overline{\Sigma}^+$	K^-　$\overline{K}^0$　Λ^0　$\Sigma^-\Sigma^0\Sigma^+$	Ξ^-　Ξ^0	Ω^-

这样赋予每一奇异粒子一个奇异数后，在强作用和电磁作用过程中奇异数守恒，而在弱作用过程中奇异数可以不守恒。

奇异数 strange number　见“奇异粒子”。

超荷 hypercharge　强子所具有的一个相加性量子数，常用符号 Y 表示，它等于重子数 B、奇异数 S、粲数 C 以及可能的其他内部量子数(如 b 或 t)之和 $Y=B+S+C+(b)+(t)$。在强作用过程中，粒子系的超荷守恒。“超荷”一词的提出最初与“超子”直接有关，它是与电荷相类似的一种相加性量子数，故名为超荷。超子 Λ 和 Σ 的超荷 $Y=0$，Ξ 超子的 $Y=-1$，Ω 超子的 $Y=-2$。超荷在强子分类中起相当重要的作用。

盖尔曼-西岛关系 Gell-Mann-Nishijima relation　1959 年盖尔曼和西岛关于电荷数 Q、同位旋分量 I_3 和超荷 Y 之间的关系分别独立地总结出的一条经验规律 $Q=I_3+\frac{Y}{2}$。由此可得如下推论：

(1) 凡 Y 为偶数的强子，其同位旋 $I(I_3)$ 为整数，Y 为奇数的强子，I 为半整数；

(2) 强子在电磁作用过程中，B、S、Q 守恒，$Y=B+S$ 也守恒，因而 I_3 守恒，I 的变化只能是零或整数，不能是半整数；

(3) 强子通过弱作用衰变时，如果末态也是强子，由重子数和电荷守恒，得到

$$\Delta I_3=-\frac{1}{2}\Delta S$$

超子 hyperon　质量超过核子的长寿命重子都称为超子。各种超子都是奇异粒子。罗彻斯特和波特勒于 1947 年在宇宙线中发现第一个超子 Λ，随后陆续发现了 Σ 超子、Ξ 超子、Ω^- 超子及其反粒子，其中 $\overline{\Sigma^-}$ 超子是 1959 年我国物理学家王淦昌领导的小组发现的。超子是不稳定的，经过 10^{-10}s 衰变为核子。

Λ 超子 lambda hyperon　最早发现的一种超子，以符号 Λ(或 Λ°)表示。Λ 超子的自旋宇称为 $J^p=\frac{1}{2}^+$，同位旋 $I=0$，不带电，奇异数 $S=-1$，重子数 $B=1$，超荷 $Y=0$，其反粒子为 $\overline{\Lambda}$，质量为 1115.6MeV/c^2，平均寿命为 2.632×10^{-10}s，主要衰变方式为 $\Lambda\longrightarrow p+\pi^-$，在强作用中与 K^0 介子协同产生，$\pi^-+p\longrightarrow\Lambda+K^0$。

除上述 Λ 超子外，也有一些重子共振态也被称为 Λ，如 $\Lambda(1405)$、$\Lambda(1520)$等，括号内数字为质量的近似值。它们的自旋宇称各不相同，有 $J^p=\frac{1}{2}^\pm$、$\frac{3}{2}^\pm$，…，但同位旋、超荷、奇异数均相同，即 $I=0$，$Y=0$，$S=-1$。

Σ 超子 sigma hyperon　超子的一种，以符号 Σ 表示。Σ 超子的自旋宇称 $J^P=\frac{1}{2}^+$，奇异数 $S=-1$，重子数 $B=1$，超荷 $Y=0$，同位旋 $I=1$，有三种不同的电荷状态 Σ^+、Σ^0、Σ^-，并且各有相应的反粒子。Σ 超子可以通过强作用协同产生 $\pi^-+p\longrightarrow\Sigma^-+K^+$，$\pi^-+p\longrightarrow\Sigma^0+K^0$。$\Sigma^+$、$\Sigma^-$ 和 Σ^0 的质量分别为 1189.37 MeV/c^2、1197.35MeV/c^2 和 1192.46 MeV/c^2，Σ^+ 和 Σ^- 的平均寿命分别为 0.8×10^{-10}s 和 1.48×10^{-10}s，而 Σ^0 的平均寿命则为 5.8×10^{-20}s。主要衰变方式有 $\Sigma^-\longrightarrow n+\pi^-$，$\Sigma^0\longrightarrow\Lambda+\gamma$。除上述 Σ 超子外，还有一些 $S=-1$、$Y=0$、$I=1$ 的共振态粒子也被称为 Σ，如 $\Sigma(1385)$。

Ξ 超子 ksi hyperon　又称级联超子，是 20 世纪 50 年代末通过加速器产生的，用符号 Ξ 表示。Ξ 超子的自旋宇称为 $J^P=\frac{1}{2}^+$，奇异数 $S=-2$，重子数 $B=1$，超荷 $Y=-1$，同位旋 $I=\frac{1}{2}$，有带负电和中性的两种 Ξ^- 和 Ξ^0，并各有相应的反粒子。Ξ^- 和 Ξ^0 的质量分别为 1321.32MeV/c^2 和 1314.9MeV/c^2，其平均寿命分别为 1.654×10^{-10}s 和 2.90×10^{-10}s，主要衰变方式为 $\Xi^-\longrightarrow\Lambda+\pi^-$，$\Xi^0\longrightarrow\Lambda+\pi^0$。

还有一些 $S=-2$,$Y=-1$,$I=\frac{1}{2}$的共振态粒子也被称为 Ξ,如 Ξ(1530)。

Ω⁻超子 omega minus hyperon 超子的一种,是 1964 年在泡室中首先发现。Ω^-超子的自旋宇称为 $J^P=\frac{3}{2}^+$,奇异数 $S=-3$,重子数 $B=1$,超荷 $Y=-2$,同位旋 $I=0$,只有一种带负电的状态。Ω^-的质量为 1672.45MeV/c^2,平均寿命 1.1×10^{-10}s,主要衰变方式为 $\Omega^-\longrightarrow\Xi^0+\pi^-$。在 Ω^-发现前,1962 年根据幺正对称理论预言它的存在,它的发现是对幺正对称理论的有力支持。

Δ粒子 delta particle 1952 年费米在芝加哥发现 π 介子和核子散射有一个很强的共振态,它是 π^+介子和质子形成的核子共振态 N^*,其自旋和同位旋均为$\frac{3}{2}$,又称 3-3 共振态,记作 N^*_{33}或 Δ(1232),表明其质量为 1232MeV/c^2,奇异数 $S=0$,重子数 $B=1$,超荷 $Y=1$。有四种不同的电荷状态 Δ^{++}、Δ^+、Δ^0、Δ^-。所发现的 Δ 粒子除 3-3 共振态 Δ(1232) $J^P=\frac{3}{2}^+$外,还有共振态 Δ(1650) $J^P=\frac{1}{2}^+$等。

介子 meson 参与强作用的自旋为整数的一类粒子,称为介子。介子又分为二类:自旋宇称为 $J^P=0^-$的一类介子称为赝标介子,它包括 π 介子、K 介子和 η 介子等;自旋宇称为 $J^P=1^-$的一类介子称为矢介子,它包括 ρ 介子、ω 介子和 ϕ 介子等。

赝标介子 pseudoscalar meson 见“介子”。

矢介子 vector meson 见“介子”。

π介子 pion 赝标介子的一种,是 1947 年鲍威尔利用核乳胶发现的。π 介子的自旋宇称 $J^P=0^-$,同位旋 G 宇称 $I^G=1^-$。π 介子有三种,π^+,π^-和 π^0,π^+和 π^-的质量为 273.3 m_e,电荷相反,互为反粒子;π^0 的质量为 264.3 m_e,不带电,其反粒子就是它本身。带电 π 介子的寿命较长,约为 2.603×10^{-8}s,衰变为 μ 子和 μ 子型中微子 $\pi^-\longrightarrow\mu^-+\bar{\nu}_\mu$,$\pi^+\longrightarrow\mu^++\nu_\mu$;不带电 π 介子寿命短,只有 0.83×10^{-16}s,主要衰变方式为 $\pi^0\longrightarrow\gamma+\gamma$ 或 $\pi^0\longrightarrow\gamma+e^++e^-$。

K介子 kaon 赝标介子的一种,是 1947 年首先在宇宙线中被发现的。K 介子的自旋宇称 $J^P=0^-$。一般情况下,K 介子总是与超子或其反粒子结伴产生(协同产生)。K 介子有带负电的 K^-和不带电的 K^0,同位旋为 $I=\frac{1}{2}$,相应的反粒子$\overline{K^-}=K^+$和$\overline{K^0}$。K 介子和反 K 介子的奇异数 S 分别为 −1 和 +1。K^+和 K^-的质量为 966.7 m_e,K^0 和$\overline{K^0}$的质量为 976 m_e。带电 K 介子的平均寿命为 1.237×10^{-8}s,主要衰变方式为(μν)、(2π)和(3π)。中性 K^0 介子衰变时表现为两种粒子的混合,一种是长寿命的 $K_L=\frac{1}{\sqrt{2}}(K^0+\overline{K^0})$,寿命为 5.183×10^{-8} s,大多数衰变为三个 π 介子,或一个 π 介子和一对正反轻子;一种是短寿命的 $K_s=\frac{1}{\sqrt{2}}(K^0-\overline{K^0})$,寿命为 0.892×10^{-10}s,衰变为两个 π 介子。

η介子 eta meson 赝标介子的一种,1961 年首先作为 3π 介子共振态而发现的。η 介子的自旋宇称 $J^P=0^-$,同位旋 G 宇称 $I^G=0^+$,电荷 $Q=0$,电荷共轭宇称 $C=+1$,质量为 548.8MeV/c^2,平均寿命约为 7.5×10^{-19}s,主要衰变为二个 γ 光子或三个 π 介子。此外,还有与 η 介子性质相同的另一粒子 η′,只是质量更大,为 958MeV/c^2。

ρ介子 rho meson 1961 年从 π 介子对共振中发现,也是最早发现的共振态矢介子,其自旋宇称 $J^P=1^-$,同位旋 G 宇称 $I^G=1^+$。有三种带电荷状态 ρ^+、ρ^0、ρ^-,其中 ρ^0 的电荷共轭宇称 $C=-1$,质量为 765MeV/c^2,平均寿命为 4.4×10^{-24}s,主要衰变为两个 π 介子。

ω介子 omega meson 1961 年从质子-反质子湮没反应中的$(\pi^+\pi^-\pi^0)$谱中发现的一种共振态矢介子。ω 介子的自旋宇称 $J^P=1^-$,同位旋 G 宇称 $I^G=0^-$,不带电,电荷共轭宇称 $C=-1$,质量为 783.8MeV/c^2,平均寿命为 6×10^{-22}s,主要衰变方式为 $\omega\longrightarrow\pi^+\pi^-\pi^0$。

φ介子 phi meson 一种共振态矢介子,自旋宇称 $J^P=1^-$,同位旋 G 宇称 $I^G=0^-$,不带电,电荷共轭宇称 $C=-1$,奇异数 $S=0$。质量为 1019MeV/c^2,平均寿命为 1.8×10^{-22}s,主要衰变为正反 K 介子。φ 介子是 1963 年在

反应 $K^- + p \longrightarrow \begin{cases} \Lambda + K^+ + K^- \\ \Lambda + K^0 + \overline{K^0} \end{cases}$ 中研究 $K-\bar{K}$ 的不变质量中发现的一个共振态，它被认为是带隐奇异数的（即由正反奇异夸克构成的）介子。

奇特原子 exotic atom 在原子核外电子壳层中含有其他带负电的基本粒子（如 μ^-，π^-，K^-，$\bar{p}$ 和 Σ^- 等）的原子。由于奇特原子的玻尔半径与带电粒子的质量成反比，而这些带负电粒子比电子重得多，因此这些粒子的轨道比电子轨道小得多，当粒子从一个轨道向另一个轨道跃迁时，发出的电磁辐射大部分是 X 射线。

1947 年费米提出形成 μ 原子的假说，不久即被实验证实。由于 μ^- 与原子核仅有电磁相互作用，μ 原子与其他奇特原子的衰变方式略有不同。对于较轻的 μ 原子，经常是 μ^- 在原子轨道上直接衰变；而对重的 μ 原子，μ^- 常被原子核俘获，并使核处于激发态。

1950 年米诺等人在核乳胶中观察到 π 原子。1956 年以后，逐步研究了 K 原子，$\bar{p}$ 原子和 Σ^- 原子的性质。这些都是强子形成的奇特原子。π^- 和原子核有强相互作用，常被核吸收，使核处于高激发态，激发能可达 100MeV 以上，此时核可放出中子、质子或其他基本粒子。

μ 原子 muon atom 见“奇特原子”。

π 原子 pion atom 见“奇特原子”。

反常核态 abnormal nuclear state 一种设想中的高密度核物质状态。这种高密度的核物质使得真空激发，从而使核子的有效质量接近于零。这是李政道在 1972 年提出的。“真空”可以看成某种标量场 ϕ 的零动量极限。在正常真空下，ϕ 的平均值 $\bar{\phi}=0$；而如果在某一宏观体积 Ω 的内部有 $\bar{\phi}\neq 0$ 的常数，就表示真空激发。

预计反常核态可能在高能重离子碰撞中产生：$U + U \longrightarrow Ab + \cdots$，式中 U 表示重离子，Ab 表示反常核态。反常核态表现为重子数 $A(\approx 400)$ 的稳定核或亚稳核，其电荷数 Z 约等于 $A/2$。反常核态一旦形成就可能通过吸收中子而使 A 继续增加；与此同时，在反常核态中会产生 e^+e^- 对；直到 $A\approx 10^4$ 时，库仑力才使反常核态成为不稳定态。

孤[立]子 soliton 非线性场方程所具有的局限在空间中不弥散的解。类似的孤子解还有二维空间中的涡旋解和三维空间中的磁单极子解等。这些孤子解的共同特点是，在无穷远处的边界条件拓扑地不同于物理的真空态，被称为拓扑孤子。此外，还可能存在另一类孤子，称为非拓扑孤子。

磁单极子 magnetic monopole 假定的只有单一磁极的磁性粒子。1931 年狄拉克根据电和磁的对称性推测有磁单极子存在，并算出其磁荷 g 为电子电荷的 28.5 倍。两个反荷磁单极子间的力是 $(68.5)^2=4692$ 倍于两个基本带电粒子间相距同距离的力。

引力子 graviton 理论上推论的引力场量子，常用符号 g 表示。从物质的统一性出发，不少人推测引力场也应与核力场、电磁场一样，有传递引力作用的量子，这就是假设中的引力子。把爱因斯坦引力场方程，在一定条件下进行量子化，可以推出：引力子如果存在，将是零电荷和零静质量的、自旋为 2 的以光速运动的玻色子。

二、强子结构
Hadronic Structure

强子结构 hadronic structure 实验表明，强子是由更深层次的物质构成的。1956 年坂田等人提出了强子的坂田模型，目前流行的强子结构模型是 1964 年盖尔曼提出的强子由夸克构成的夸克模型。

坂田模型 Sakada model 1956 年坂田昌一(Sakada)提出的一种强子结构模型。该模型把质子 p、中子 n 和 Λ 超子以及它们的反粒子($\bar{p}$，$\bar{n}$，$\bar{\Lambda}$)作为构成一切强子的基本粒子，其他一切强子都是由它们结合成的束缚态。

坂田模型成功地解释了赝标介子的组成和性质，正确预言了 η 介子、ρ 介子、φ 介子和 K 介子的存在。但在解释重子组成时遇到了困难。坂田模型的价值在于首次研究了强子的结构。

夸克 quark 实验表明，强子是由更深层次的物质构成的，夸克是一种理论上假设的构成强子的组成粒子，常用符号 q 表示。1964 年，盖尔曼（Gell-Mann）和兹外（Zweig）分别假设夸克的存在，以解释基本粒子的对称性，但迄今未发现任何自由的夸克。在盖尔曼和兹外的夸克理论中，有三种夸克（称为轻夸克）：上夸克 u、下夸克 d 和奇异夸克 s；进一步研究还有三种重夸克：粲夸克 c、底夸克 b 和顶夸克 t。每种夸克都是自旋为 $\frac{1}{2}$ 的费米子，夸克的重子数、电荷和超荷都是分数，各夸克所带量子数如表所示。

味		重子数 B	电荷 e	超荷 Y	同位旋 I	同位旋分量 I_3	奇异数 S	粲数 C	底数 b	顶数 t	提出日期
轻夸克	u	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	0	0	0	1964 年
	d	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{1}{3}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	0	
	s	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	0	0	-1	0	0	0	
重夸克	c	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	0	0	0	1	0	0	1974 年
	b	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{2}{3}$	0	0	0	0	-1	0	1978 年
	t	$\frac{1}{3}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{4}{3}$	0	0	0	0	0	1	

每种夸克都有其反粒子——反夸克 $\bar{q}$，$\bar{q}$ 所带量子数 B、e、Y、I_3、S、C、b、t 为对应夸克 q 的负值。例如 $\bar{u}$ 的 $B=-\frac{1}{3}$，电荷为 $-\frac{2}{3}$，超荷 $Y=-\frac{1}{3}$，$I_3=-\frac{1}{2}$，其余量子数 S、C、b、t 均为 0，而 I 仍为 $\frac{1}{2}$。

夸克模型 quark model 1964 年盖尔曼提出的强子结构模型——夸克模型。该模型认为所有强子均由若干个夸克组成。重子由三个夸克组成（qqq），例如质子 p 由 uud 构成，中子 n 由 udd 构成，Σ^+ 由 uus 构成等；介子由一个夸克和一个反夸克构成（$q\bar{q}$），例如 π^+ 由 $u\bar{d}$ 构成，K^+ 由 $u\bar{s}$ 构成，新粒子 D^+ 由 $c\bar{d}$ 构成等。根据夸克模型，强子具有的内部相加性量子数 B、Q、Y、I_3、S、C、b、t 等均能给予很好的解释。

夸克的味 flavor of quark 根据夸克具有的强子的内部量子数的不同，分为上夸克 u、下夸克 d、奇异夸克 s、粲夸克 c、底夸克 b 和顶夸克 t。以 u、d、s、c、b、t 表征的夸克自由度称为味自由度。轻夸克的味自由度 $N_f=3$，重夸克的味自由度 $N_f=3$，全部夸克的味自由度 $N_f=6$。夸克的味自由度，简称为夸克的味。

夸克的色 color of quark 夸克除具有味自由度外，还具有另一种内部自由度——色自由度，当初是为了解决强子结构模型中的统计困难而提出的。每种夸克都具有三种不同的色。目前，不同作者对这三种色所用的符号不统一，有的用“红、蓝、绿”，有的用“红、蓝、黄”，因为它们并不是真正的颜色，符号可以任用。这样，每味夸克都有三色，不同“味”“色”的夸克可以成为无色强子。引入色量子数后，可以很好地解释强子的组成。例如重子 $\Delta^{++}(1232)$ 是由 uuu 组成，自旋为 $\frac{3}{2}$。由于夸克为费米子，服从费米统计，其波函数是交换反对称的。根据泡利原理，三种相同的夸克 u，如果夸克没有色自由度，则不可能组成总自旋为 $\frac{3}{2}$。引入色量子数，这三个 u 分别具有不同色量子数

红、蓝、绿，处于不同的量子态，仍可形成自旋为$\frac{3}{2}$的Δ^{++}(1232)粒子，而不违背泡利原理。

胶子 gluon　传递夸克之间强相互作用并使之结合成强子的粒子，是一种无质量的矢量粒子。理论上，量子色动力学中传递相互作用的媒介为胶子场，胶子场的量子就是胶子，它与量子电动力学中光子的地位相当。胶子本身带色，具有八种可能的色，它不仅与夸克有相互作用，而且胶子本身之间也有相互作用，夸克和胶子之间是通过色自由度而发生耦合。目前在实验上未发现自由状态的胶子，一般认为其原因是由于胶子和夸克一样被囚禁。但是，丁肇中领导的小组通过研究高能过程中产生的硬胶子物化成的胶子喷注，得到了胶子存在的间接证据。根据量子色动力学，可以有只含胶子而不含夸克的束缚态，称为胶子球，实验上已发现了存在胶子球的迹象。

胶子球 glueball　见“胶子”。

夸克囚禁 quark confinement　1964 年夸克模型提出以来，成功地说明了强子是由夸克构成的，夸克是比强子更深一个层次的粒子，但至今实验上尚未找到自由夸克。对此，除了假设夸克很重，目前的能量还不足以把它们从强子中分出外，一种可能的解释是认为夸克是由于某种原因被囚禁在强子内部而不能以自由状态存在，这就是所谓的夸克囚禁。

新粒子 new particle　1974 年以前发现的强子都是由轻夸克(u、d、s)及其反夸克($\bar{u}$、$\bar{d}$、$\bar{s}$)构成。1974 年以来，相继发现了一些质量远大于核子质量而宽度远小于一般强子共振态宽度的强子，称为新粒子。它包括 J/ψ、D^+、D^-、D^0 和 Υ 等粒子。按照夸克模型，新粒子是指其内部含有重夸克(c、b、t)及其反夸克($\bar{c}$、$\bar{b}$、$\bar{t}$)的粒子。带有粲数的粒子称为粲粒子，例如 J/ψ 粒子是由 $c\bar{c}$ 构成的矢介子，ψ′是 J/ψ 的激发态，η_c 粒子是由 $c\bar{c}$ 构成的赝标介子。D^0、D^+是由粲夸克 c 分别和反轻夸克 $\bar{u}$、$\bar{d}$ 组成的介子。实验还发现一些含粲数的重子的证据，如 Λ_c 和 Σ_c。Υ 粒子是 $b\bar{b}$ 构成的束缚态。各种新粒子的性质见下表。

新粒子	质量/(GeV/c^2)	J^{PC}	I^G	I_3	S	C	电荷 e	备　注
J/ψ	3.1	1^{--}	0^-	0	0	0	0	1974 年丁肇中和里希特独立发现
D^+ D^-	1.87	0^-	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$ $-\frac{1}{2}$	0	+1 −1	+1 −1	1976 年以后发现
D^0	1.87	0^-	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	+1	0	1976 年在斯坦福电子-正电子对撞机上发现
D_s^+ D_s^-	1.97	0^-	0	0	+1 −1	+1 −1	+1 −1	1976 年以后在联邦德国的电子-正电子对撞机上发现
Υ	9.5	1^{--}	0	0	0	0	0	1977 年莱德曼小组发现

J/ψ 粒子 J/psi particle　1974 年，丁肇中和里希特(Richter)独立发现一个质量约为 3.1GeV/c^2 的矢介子，被称为 J/ψ 粒子。它是由粲夸克 c 和反粲夸克 $\bar{c}$ 结合成的矢介子，其自旋宇称 $J^P=1^-$，电荷共轭宇称 $C=-1$，同位旋 G 宇称 $I^G=0^-$，奇异数 $S=0$，不带电。它的奇特性质是质量大而宽度小(宽度约为 67keV)，即它的强衰变是禁戒的，因而 J/ψ 是 $c\bar{c}$ 组成的束缚态。粲夸克 c 和反粲夸克 $\bar{c}$ 构成的束缚态，又称为粲子偶素。

粲数 charm　与强子性质有关的一个相加性量子数，常用 C 表示。它是粲夸克带有的一

个新量子数，规定粲夸克 c 的 $C=+1$，反粲夸克 $\bar{c}$ 的 $C=-1$，其他夸克不带粲数。粲数在强相互作用过程中守恒。在弱作用过程中粲数不守恒，因此粲粒子通过弱作用衰变时，粲数会发生变化。

粲粒子 charmed particle 见“新粒子”。

粲子偶素 charmonium 见“J/ψ 粒子”。

ϒ粒子 upsilon particle 1977 年莱德曼小组观察质子-质子碰撞产生的 μ 子对时，在 9.5GeV 处看到一个凸峰（实际上是靠近的两个凸峰），并且证实它至少由两个共振态组成。1978 年原西德科学家以电子-正电子相碰撞也发现质量为 $9.46\mathrm{GeV}/c^2$ 的共振态粒子，寿命不到 10^{-18}s，被称为 ϒ 粒子。一般认为 ϒ 粒子是由第五种夸克——底夸克 b 及其反夸克 $\bar{b}$ 组成的束缚态 $b\bar{b}$。$b\bar{b}$ 又称为底子偶素。ϒ(9.46)被认为是底子偶素的基态。实验上还发现 ϒ′(10.016)和 ϒ″(10.38)，它们是底子偶素的激发态。

底数 bottom number 它是底夸克带有的一个相加性量子数，用符号 b 表示。规定底夸克的 $b=-1$，反底夸克的 $b=+1$，其他夸克的 $b=0$。

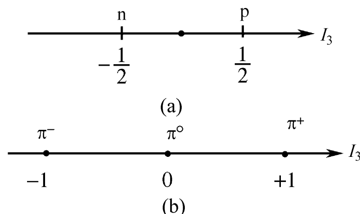
底子偶素 bottonium 见“ϒ 粒子”。

中间矢量玻色子 intermediate vector boson (IVB)传递弱作用的媒介子，又称中间玻色子。中间玻色子具有以下性质：(1)自旋为 1，宇称不确定；(2) 有带电的和电中性的，带电的用符号 $W^{\pm}$表示，所带电荷为±1，电中性的用符号 Z^0 表示；(3)质量相当大，$M_W=(81.8\pm1.5)\mathrm{GeV}/c^2$，$M_Z=(92.6\pm1.7)\mathrm{GeV}/c^2$。

原来，中间玻色子是弱电统一理论中设想存在的一种传递弱作用的粒子，由于质量很大，难以在实验上发现。1983 年 1 月西欧核子研究中心(CERN)的 UA1 组和 UA2 组在质子-反质子对撞机上发现了带电中间玻色子 W^+和 W^-。两个实验组又分别于 1983 年 6 月和 7 月发现了电中性中间玻色子 Z^0。$W^{\pm}$和 Z^0 的发现，直接有力地证实了弱电统一理论的正确性。

中间玻色子的可能的轻子型衰变有：$W^{\pm}\longrightarrow e^{\pm}+\nu_e(\bar{\nu}_e)$，$W^{\pm}\longrightarrow\mu^{\pm}+\nu_\mu(\bar{\nu}_\mu)$，$W^{\pm}\longrightarrow\tau^{\pm}+\nu_\tau(\bar{\nu}_\tau)$；$Z^0\longrightarrow\nu+\bar{\nu}$，$Z^0\longrightarrow l^{+}+l^{-}$，式中 l 表示电子、$\mu$ 子或 τ 子。中间玻色子也有可能衰变为夸克-反夸克对，然后转变成强子。

粒子的同位旋多重态 isospin multiplet of particles 这是核物理中同位旋多重态概念的推广。在粒子物理中，自旋相同、质量近乎相等且同位旋 I 相同的粒子可以构成粒子的同位旋多重态。同位旋多重态的不同组元只是 I_3 不同，组元数为 $2I+1$，不同组元可用 I_3 来区别。例如 $I=\frac{1}{2}$的核子的同位旋双重态，有两个组元 p 和 n，分别相应于 $I_3=\frac{1}{2}$和 $I_3=-\frac{1}{2}$，可用图(a)表示；$I=1$ 的 π 介子的同位旋三重态，有三个组元 π^+、π^0 和 π^-，分别相应于 $I_3=1,0,-1$，可用图(b)表示。



一个同位旋多重态，就强作用而言是相同的，只是由于电磁作用而区分开，引起质量有些差别。

幺旋 unitary spin 同位旋的一个推广，它是由同位旋的第三分量 I_3 和超荷 Y 组成的一个复合量子数(I_3, Y)。幺旋在数学上用 $SU(3)$ 群描述，描述同位旋的 $SU(2)$群是 $SU(3)$群的一个子群。假定存在具有 $SU(3)$对称的超强相互作用，就会使得具有不同超荷的几个同位旋多重态合并成一个更大的幺旋多重态，有幺旋八重态和幺旋十重态等。

幺旋八重态 unitary spin octet 有八个赝标介子($J^P=0^-$)构成的介子幺旋八重态（又称赝标介子八重态）和八个稳定重子$\left(J^P=\frac{1}{2}^+\right)$构成的重子幺旋八重态（又称重子八重态），它们由三个不同超荷的同位旋多重态构成。根据夸克模型，介子是由夸克和反

夸克组成的束缚态(见表 1),将介子的幺旋八重态按幺旋(I_3, Y)画在 I_3— Y 图上(如图 1)。

表 1

粒子	组成	I	I_3	Y	Q	B
π^+	$u\bar{d}$	1	1	0	+1	0
π^-	$d\bar{u}$		−1		−1	
π^0	$\frac{1}{\sqrt{2}}(u\bar{u}-d\bar{d})$		0		0	
K^+	$u\bar{s}$	$\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$	+1	+1	0
K^-	$s\bar{u}$		$-\frac{1}{2}$	−1	−1	
K^0	$d\bar{s}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	+1	0	0
$\overline{K^0}$	$s\bar{d}$		$+\frac{1}{2}$	−1	0	
η	$\frac{1}{\sqrt{6}}(u\bar{u}+d\bar{d}-2s\bar{s})$	0	0	0	0	0

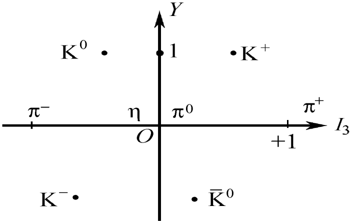


图 1　赝标介子八重态图

根据夸克模型,重子是由三个夸克组成的束缚态(见表 2),将重子八重态按幺旋(I_3, Y)画在 I_3— Y 图上(见图 2)。

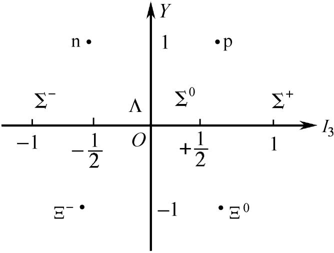


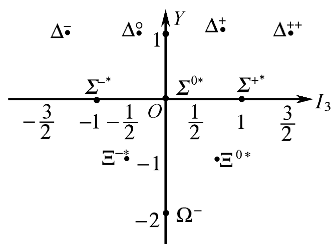
图 2　重子八重态

表 2

粒子	组成	I	I_3	Y	Q	B
p	uud	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	+1	1
n	udd		$-\frac{1}{2}$		0	
Σ^+	uus	1	1	0	+1	1
Σ^0	uds		0		0	
Σ^-	dds		−1		−1	
Ξ^0	uss	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	−1	0	1
Ξ^-	dss		$-\frac{1}{2}$		−1	
Λ	uds	0	0	0	0	1

幺旋十重态　unitary spin decuplet　有十个重子共振态$\left(J^P=\frac{3}{2}^+\right)$组成重子幺旋十重态(又称重子十重态),这是由四个不同超荷的同位旋多重态构成(见下表),将重子十重态按幺旋(I_3, Y)画在 I_3-Y 图上(如下页图)。

粒子	组成	I	I_3	Y	Q	B	质量/(MeV/c^2)
Δ^{++}	uuu	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	2	1	1230
Δ^+	uud		$\frac{1}{2}$		1		1232
Δ^0	udd		$-\frac{1}{2}$		0		1234
Δ^-	ddd		$-\frac{3}{2}$		−1		1236
Σ^{+*}	uus	1	1	0	1	1	1383
Σ^{0*}	uds		0		0		1385
Σ^{-*}	dds		−1		−1		1387
Ξ^{0*}	uss	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	−1	0	1	1532
Ξ^{-*}	dss		$-\frac{1}{2}$		−1		1535
Ω^-	sss	0	0	−2	−1	1	1672



重子十重态图

值得指出，这个重子十重态在1962年还缺少一个，取名为Ω^-。盖尔曼从理论上预言了Ω^-的性质，1964年发现了Ω^-超子，证实了理论预言。

弱电统一理论 weak electromagnetic unified theory 20世纪60年代后期发展起来的一种统一描述弱作用和电磁作用的理论。原有的量子电动力学认为，电磁相互作用是通过交换光子而传递的。光子是自旋为1，质量为零的矢量玻色子。由于电磁场是一种规范场，所以光子又称为规范粒子。50年代有人提出弱作用也是通过交换自旋为1、但质量很大的中间矢量玻色子传递的。因为这种中间矢量玻色子很重，难以交换，所以弱作用比电磁作用要弱几个数量级。60年代中期格拉肖(Glashow)、温伯格(Weinberg)和萨拉姆(Salam)发展了一种场论处理方法，假定中间矢量玻色子原来与光子一样也是质量为零的规范粒子，但在考虑到真空自发破缺以后，通过所谓希格斯(Higgs)机制，可使中间矢量玻色子获得很大质量，而光子仍保持它原有零静止质量。这样，光子和中间矢量玻色子就都属于同一族粒子。典型的弱作用是原子核β衰变，$n \longrightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$，由于核子的夸克组成，n(udd)，p(uud)，所以β衰变可表示为$d \longrightarrow u + e^- + \bar{\nu}_e$。传递弱作用的中间矢量玻色子$W^\pm$、$Z^0$对轻子和夸克的耦合与传递电磁作用的光子对轻子和夸克的耦合，也即弱作用和电磁作用是统一的。正如电作用和磁作用是同一种电磁作用的两种不同表现一样，弱作用和电磁作用也只不过是同一种弱电相互作用的两种不同表现而已。中间矢量玻色子的发现，直接证实了弱电统一理论的正确性。

量子色动力学 quantum chromodynamics (QCD) 强相互作用的一种可重整化的量子场论，它的基本组元是带有分数电荷的自旋为$\frac{1}{2}$的夸克场(夸克)和自旋为1的非阿贝尔规范场(胶子)。夸克和胶子之间以及胶子相互之间通过色荷进行相互作用。强子之间的强作用归结为组成强子的夸克与胶子之间的相互作用。夸克有味和色两种自由度，夸克之间的电磁作用和弱作用是通过味自由度进行的，而强作用则是通过色自由度进行的。每味夸克都带有三种“色荷”，胶子有八种可能的色荷。在强相互作用中，带色荷的粒子交换胶子。量子色动力学是一种成功的理论，但在低能区需进一步的发展。

标准模型 standard model 弱电统一理论和强相互作用理论(量子色动力学)的统称。标准模型是目前物理学家对宇宙的一种最朴素的看法：组成宇宙的最基本砖块是三代轻子和三代夸克，每“代”包含二个粒子，六种轻子和六种夸克相对应(见表)。

	轻子自旋$\frac{1}{2}$			夸克自旋$\frac{1}{2}$		
代	味	质量 (GeV/c^2)	电荷	味	质量 (GeV/c^2)	电荷
1	ν_e	$<2\times10^{-8}$	0	u	4×10^{-3}	$\frac{2}{3}$
	e	5.1×10^{-4}	−1	d	7×10^{-3}	$-\frac{1}{3}$
2	ν_μ	$<3\times10^{-4}$	0	c	1.5	$\frac{2}{3}$
	μ	0.106	−1	s	0.15	$-\frac{1}{3}$
3	ν_τ	$<4\times10^{-2}$	0	t	174	$\frac{2}{3}$
	τ	1.778	−1	b	4.7	$-\frac{1}{3}$

考虑到每个粒子都有它的反粒子，所以基本砖块共有12种轻子和12种夸克。这些基本砖块之间的相互作用的媒介子是几种规范粒子——光子、中间矢量玻色子$W^\pm$、Z^0和胶子。

夸克具有味和色两种内部自由度，每种夸克都带有三种“色荷”，胶子有八种可能的“色荷”。夸克之间的电磁作用和弱作用是通过味自由度进行的，强作用是通过色自由度进行的。在强作用中，带色荷的粒子交换胶子。夸克和胶子不能单独存在，它们都禁闭在色中性的强子内。轻子、光子、中间玻色子 $W^{\pm}$、Z^0 都没有色荷，它们不参与强相互作用，它们之间的电磁作用和弱作用是通过味自由度进行的。迄今为止，在标准模型理论和实验之间还没有发现存在矛盾。但标准模型理论中无量纲参数多达 20 多个，这表明在标准模型理论内部还包含有相当大分量的现象性理论的成分，必须探索这部分现象性理论的本质，使之上升为更基本理论。

大统一理论 grand unified theory 将强作用、电磁作用和弱作用统一在一起的理论。在弱电统一理论取得成功后，推动了将强、弱、电磁三种作用统一起来的尝试，提出了许多种理论方案，但都还不成熟。在目前提出的所有大统一理论中，重子数和轻子数都不再分别守恒，因而质子不再是稳定的粒子，质子衰变的典型方式 $p \longrightarrow \pi^0 + e^+ + \nu_e$，粗略估算其寿命为 $10^{29} \sim 10^{33}$年，与目前实验定出的质子寿命的下限 $\tau_p \geqslant 2\times10^{30}$年相近。但大统一理论预言的新的规范粒子 X，不同理论估算出 X 粒子质量却相差甚远，可见理论还不成熟。

三、探测仪器和加速器

Detecting Instrument and Accelerator

电离损失 ionization loss e、p、d、α 或重离子等带电粒子通过物质时，与靶原子的电子发生非弹性碰撞而使靶原子电离或激发，从而造成的能量损失。电离损失是带电粒子通过物质时能量损失的主要方式。

辐射损失 radiation loss 入射带电粒子受到靶核库仑场的作用，其运动速度方向和大小发生变化，即有加速度，从而辐射光子损失能量。能量损失率 $\left(-\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right)$ 与入射粒子的质量 m、电荷数 Z_1、能量 E 及靶核的电荷数 Z_2、单位体积靶核数 N 有关：

$$\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}x}\right) \propto \frac{Z_1^2 Z_2^2}{m^2} NE$$

由于电子质量 m 很小，所以电子与物质作用时，辐射损失是能量损失的重要方式。

碰撞损失 collision loss 入射带电粒子受到靶核库仑场作用而改变运动方向，但不辐射光子也不使靶核激发，仅将一部分能量转移给靶核的弹性散射过程。碰撞损失通常是很小的。

入射带电粒子和核外电子也可发生弹性碰撞，但能量转移极小。仅当入射 β 粒子的能量低于 100eV 时才需考虑碰撞损失。

电荷交换效应 charge exchange effect 入射离子在靶物质中失去电子或俘获靶核的核外电子的过程。这种过程可交替地多次发生，直至离子的速度降低到热运动速度，离子变成中性原子为止。

射程 range 带电粒子入射到某物质上时，从入射点到终止点的连线在其初始入射方向上投影的长度。带电粒子与物质原子碰撞时运动方向发生改变，因而射程通常小于路程。重的带电粒子由于碰撞导致的运动方向改变不大，射程与路程近似相等。

比电离 specific ionization 带电粒子通过物质时，沿其轨道的单位长度上形成的离子对数目。

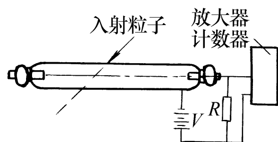
电离能 ionization energy 带电粒子通过物质时，平均每产生一对离子或一个电子-空穴对所消耗的能量。电离能与带电粒子的性质和能量基本无关。在气体中电离能约为 30eV，而在半导体材料 Ge 中产生一个电子-空穴对时所需的能量约为 3eV。

死时间 dead time 几乎所有的仪器，在探测到一个事件后，接着就有一段不灵敏的时间，称之为该仪器的死时间，它限制了仪器每单位时间能够记录事件的数目。例如盖-缪计数管在每一次计数放电后，正离子使其阳极附近的电场降低，以致不能新的计数。只有在正离子逐渐跑向阴极，同时外电源使电极间的电压恢复正常以后，计数管才能记录下一个进入的粒子。计数管在计数后不能工作的这段恢复时间称为计数管的死时间或恢复时间。

时间分辨率 time resolving power 分辨时间的倒数。所谓分辨时间是指探测仪器能够区分两个相继入射粒子的最短间隔时间。如果在分辨时间间隔内入射两个或两个以上粒子,仪器只能记下第一个粒子。显然,分辨时间越短,时间分辨率越高,则漏记的粒子数越少,仪器性能就越好。

空间分辨率 space resolving power 指仪器对两个非常靠近的物点刚能加以识别的能力,通常以刚能分辨两物点间的距离的倒数定义为仪器的空间分辨率,即仪器对粒子定位的精确度。显然,分辨距离越小,空间分辨率越高,仪器的性能越好。

充气计数器 gas-filled counter 利用核辐射通过气体时使气体发生电离从而测量核辐射强度的核辐射探测器。一般构造如图所示。在装有气体的容器中有一金属细丝正电极,而容器壁作为负电极。当核辐射射入时使气体分子电离,产生的电子和正离子被电极吸引而形成脉冲电流,在电路的高电阻上转换为脉冲电压,经过放大器放大后送至脉冲分析器或记数器以测定脉冲的强度和个数。根据电极所加电压(工作电压)的高低,可分为电离室、正比计数器和盖-缪计数器。



充气计数器示意图

电离室 ionization chamber 一种利用核辐射在气体中产生的离子而形成的电讯号来测定电离辐射的充气计数器,其工作电压应选择在饱和电流工作状态。这时射线产生的全部正离子-电子的正负电荷未经复合而全部到达电极。电离室分为脉冲电离室和电流电离室。前者可记录单个辐射粒子的电离辐射,主要用于重带电粒子的能量和强度的测量;后者用来记录大量辐射产生的平均效应,主要用于 X 射线、γ 光子、β 粒子和中子的强度和剂量的测量。

固体探测器 solid state detector 又称固体电离室,是一种以固体材料为工作媒质的核辐射探测器,其代表为半导体探测器。其工作原理与电离室的工作原理相似,不同之处在于载流子的种类:在电离室中载流子为电子和正离子,而在半导体探测器中则为电子和空穴。当一带电粒子射入半导体中,其价带电子可吸收此粒子能量而跃迁至较高能带,于是在价带上留下一空穴。半导体探测器通常有两种类型:(1) 金硅面垒型,它是一块硅单晶片上涂一层金膜,在金硅交界面附近形成高阻区;(2) 锗(或硅)-锂扩散型,它是使适量的锂扩散进入一块 p 型锗(或硅)单晶,形成高阻区。使用时,探测器接上反向电压,当有射线进入高阻区时,损耗能量产生电子-空穴对,在电场作用下由电极吸引载流子而输出电讯号,再由电子仪器记录。前一种探测器适合测量带电粒子,后一种适合于测量 γ 射线,但一定要在低温(77K)真空条件下使用。

半导体探测器 semiconductor detector 见“固体探测器”。

正比计数器 proportional counter 工作电压在正比区的充气计数器。当工作电压超过饱和区工作电压时,核辐射在电离室中初级电离产生的离子,在强电场作用下加速运动的过程中多次与气体分子碰撞而产生次级电离。于是离子数目以某一倍数增加,等于初级离子对数乘一增殖因数,此增殖因数一般为 10^5 或 10^6 数量级。电子-离子对数得到放大且与初级电子-离子对数成正比的充气计数器,即为正比计数器。正比计数器具有脉冲幅度大、灵敏度高和脉冲幅度受初级离子发生的位置影响小等优点。

盖-缪计数器 G-M counter 1928 年由德国人盖革与缪勒(Geiger and Muller)发明的一种测定 γ 与 β 射线的充气计数器。通常由圆筒形阴极和在其轴线上的金属丝阳极组成的。筒内装有适当的混合气体(如氩与乙醚或溴),两极间所加电压因筒之大小和气压高低而不同,通常在 1000V 以上。此工作电压比正比计数器使用的电压更高,电场更强。在此工作电压下,当入射粒子射入管内使气体电离时,所产

生的电子和正离子在强电场作用下加速并不断地与管内气体分子碰撞而产生二次电离，迅即在整个管内产生全面的雪崩式放电。在一定的电压条件下，入射粒子只要超过一定的最低能量，都能引起雪崩放电而被计数，且放电电流相同，与入射粒子的种类和能量无关。加给计数器的电压愈高，能引起计数的入射粒子的最低能量愈小，计数率愈高。盖-缪计数器具有灵敏度高、脉冲幅度大等优点，但存在不能鉴别粒子的种类和测定粒子的能量、分辨时间长和乱真计数等缺点。

多丝正比室 multiwire proportional chamber 一种探测高能粒子位置的气体探测器。这种装置由大量平行细线组成。这些细线（阳极丝）处于两块相距几厘米的阴极平面之间的一个平面内（每个丝平面构成一个单元），细线直径约十分之一毫米，间距约 1 或几毫米。1968 年夏帕克（G. Charpak）认识到每根丝都会像正比计数器一样工作，其空间精度可达 1mm 或更小些，每根丝都以高达每秒数十万次的速度记录粒子，每根丝都有一个放大器，并可用计算机记录信号。多丝正比室通常用两个到三个相互垂直的丝平面，从而可确定粒子径迹的空间位置。多丝正比室内充以气体，电极间加上高压正比区的直流电压。当高能带电粒子穿过多丝正比室时，使路径上气体原子电离，电离产生的电子在附近某一金属丝电场中形成雪崩，其放电的总电量正比于初始电离中电子的数目，放电形成的负脉冲正比于该粒子的电离损失。利用专门的电子学线路将这些脉冲放大，甄别成形，储存和编码送到计算机分析处理就可以知道哪根丝上有信号，从而确定入射粒子穿过室的位置，进一步由多个单元定出粒子的径迹。

漂移室 drift chamber 在多丝正比室的基础上发展起来的一种探测器。其结构与多丝正比室相似，在一充有气体的容器中，由三个平面电极组成，并以金属细丝作为接收信号丝（灵敏丝）。当高能带电粒子穿过漂移室中气体时，使沿路径上的气体原子电离，电离产生的电子在由细丝形成的恒定的均匀电场作用下漂移到达灵敏丝，并形成放电而被记录下来。由于漂移到灵敏丝的时间是入射粒子到灵敏丝的距离的函数，因而空间定位比多丝正比室更准，可达 50～100μm，空间分辨率可达 0.1mm，死时间为几百纳秒左右，最高计数率约为每秒一万次计数。

切伦科夫辐射 Cerenkov radiation 高能带电粒子在介质中的速度 v 超过光在该介质中的速度 $\frac{c}{n}$（n 为介质折射率）时所发出的电磁辐射。早在 1937 年，切伦科夫（Cerenkov）就发现铀盐溶液中的这种发光现象，称为切伦科夫辐射，这是一种包括可见光在内的连续谱。切伦科夫辐射是发射在半角为 θ 的一个圆锥体中，圆锥的轴就是入射粒子的方向，而

$$\cos\theta=\frac{c}{nv}$$

由于 v 的最小值为 $\frac{c}{n}$，这时 $\theta=0°$，所以切伦科夫辐射具有极强的方向性。

切伦科夫计数器 Cerenkov counter 一种在暗盒中装有透明介质（辐射体）和光电倍增管的高能粒子探测器。辐射体可以是气体、液体或固体。当匀速运动的高能粒子在介质中的速度超过光在该介质中的速度时就会发出切伦科夫辐射。由光电倍增管接收这些辐射而产生电脉冲，再由脉冲电路记录。

光电倍增管 photomultiplier 利用光电效应把光转换为光电子并使之倍增以获得较大的电流脉冲的一种元件。它的外形如较大的电子管，是由光阴极、联极（通常有 10～12 个电极，又称二次发射极）和阳极（集电极）组成。光入射到光阴极上，打出光电子，再经联极将光逐级成倍地放大，最后把倍增后的光电子由集电极收集起来，在输出端形成电压脉冲。电子经联极时每级可增加 6～12 倍，而联极有 10 多级，故放大倍数可高达 10^6～10^7。

闪烁计数器 scintilation counter 利用某种射线与物质相互作用时使物质发荧光现象来记录射线的探测器。它由闪烁体、光电倍增管和相关的电子学线路组成。闪烁体是透明的荧光体，例如无机晶体碘化钠（铊）、有机晶体蒽和萘、塑料闪烁体和液体闪烁体等。当一个粒子射入荧光体中时，使其中的原子激发而后

发出一次闪光，此闪光经光电倍增管接收、放大并转换为电脉冲输出，再由电子仪器记录下来。这种计数器的优点是分辨时间短，效率高。根据脉冲的大小，还可以测定粒子的能量。

火花室 spark chamber 即火花放电室，它是一种利用气体放电原理而制成的高能粒子径迹探测器。通常由几块平行金属板(或同心圆套筒)组成。平行板之间有良好的绝缘，在极板之间充以惰性气体。当带电粒子穿过火花室时，在粒子经过的地方形成离子对，如此时每相邻极板加上很高的脉冲电压(10～20kV)，则在粒子经过的地方产生火花放电。各个极板之间的火花就组成了入射粒子的径迹。火花室具有结构简单、操作方便、探测效率高、灵敏体积大、时间分辨本领大等优点。

流光室 steamer chamber 在火花室基础上进一步发展起来的高能粒子径迹探测器。流光室一般由三个平板电极组成两个间隔而构成，中间极板接高压，两边极板接地，室内充以氖或氦。主要是把加到火花室极板间的高压脉冲限制得很窄(3～20ns)，使带电粒子所产生的电子雪崩只能引起火花放电前期的流光，流光中心显示出较细致的粒子径迹，再通过照相记录下来。

核乳胶 nuclear emulsion 一种记录带电粒子径迹的特制照相乳胶。它比一般的照相乳胶层厚、密度大，即含更多的溴化银，且颗粒细，分布均匀。当带电粒子穿过核乳胶层时，可使其径迹上的原子发生电离并在照相底板中形成潜像，经显影和定影后可显示出粒子的径迹，再在显微镜下测量。利用核乳胶，曾发现过 $\pi^{\pm}$、$K^{\pm}$等粒子。核乳胶的优点是体积小、轻便、阻止本领大、作用机会多、连续灵敏、空间分辨率高、能将高能粒子的径迹永久保存等。它不但可用作探测器，也可由放射性工作者随身佩带，作为自身剂量的监察和记录仪器。

云室 cloud chamber 又称威尔孙(Wilson)云室或膨胀云室，是观测记录粒子径迹的仪器。云室内充满空气及水和酒精的饱和蒸气。工作时，使云室主体突然膨胀而变冷，蒸气变为过饱和状态。当带电粒子通过时，在它经过的路径上产生离子对，过饱和蒸气即以离子为核心凝成雾滴，在适当的照明下就能看到或拍摄到粒子运动的径迹。根据径迹的长短、浓淡以及在磁场中的弯曲度，就可分辨粒子的种类和性质(如质量、电荷和能量)。利用云室，发现过正电子、μ 子、K^0 介子和 Λ、Σ^-超子等。

膨胀云室 expansion cloud chamber 见“云室”。

扩散云室 diffusion cloud chamber 其结构与膨胀云室不同，一般在云室主体上下维持一定的温度差使高温端的水和酒精蒸气不断地向低温端扩散，在扩散过程中逐渐冷却。结果在低温端附近某一区域内形成过饱和蒸气，以带电粒子通过时产生的离子为核心凝成雾滴，从而可以观测带电粒子的径迹。它的优点是可以连续工作，结构简单；缺点是饱和区域较小，径迹不够清晰。

泡室 bubble chamber 又称气泡室，一种工作物质为液氢(或液氦、液氖、丙烷等)的高能粒子运动径迹探测器。泡室中的液体保持一个比它的沸点高得多的温度，对其加上高压使之不沸腾。在液体突然减压而膨胀时使之处于过热状态，当有产生电离作用的粒子通过时，则液体沿粒子径迹的地方发生沸腾而产生气泡，从而显示出粒子的径迹。泡室兼有核乳胶和云室两者的优点。

高能探测器 high energy detector 利用高能粒子与物质相互作用时所产生的物理效应(电离、电火花、荧光等)来探测粒子的种类、数目、路径、速度、寿命、电荷、质量、动量、能量和自旋等参量的实验仪器。通常高能探测器应当具有相当高的空间分辨率、时间分辨率和能量分辨率。

量能器 calorimeter 测量粒子能量的装置。测量方法一般由一块大体积吸收体和探测器，把要测量的高能粒子的能量全部吸收在里面，由此测量粒子的能量。

晶体球 crystal ball 装置在斯坦福直线加速器中心(SLAC)的一种大立体角、高效率、高分辨率的光子探测仪器，它的主体是两个半球，每个半球内包含 336 块 NaI 晶体闪烁体，

当粒子通过时 NaI 受激发而发荧光。在球内有火花室和多丝正比室,在球两端的“帽子”上还有附加的 NaI 晶体和火花室。利用这样的装置可以覆盖整个 4π 立体角的 98%。晶体球是 1978 年建成使用的。利用它可探测粲子偶素激发态衰变时发出的光子,以研究粲子偶素谱。

磁谱仪 magnetic spectrometer　利用电磁学方法研究带电粒子能谱的仪器。它包括 α 谱仪、β 谱仪、重离子磁谱仪、单臂谱仪和双臂谱仪等。

单臂谱仪 single-arm spectrometer　测量末态粒子并分析其电荷及动量分布的一种磁谱仪。它只有一条臂,由聚焦磁铁、偏转磁铁及各种高能探测器(如闪烁计数器、切伦科夫计数器、多丝正比室、漂移室等)排成一列组成,其立体角和动量接收度都很小,只能测量一个末态粒子。适用于总截面和微分截面以及研究单举过程等高能物理问题的研究。

双臂谱仪 double-arm spectrometer　由两条臂组成的一种磁谱仪。这两条臂可以是对称的也可以是不对称的。它可同时测量两个末态粒子的事例。1974 年丁肇中小组用对称的大型精密的双臂谱仪测量高能质子轰击铍靶产生的正负电子对,从而发现了 J/ψ 粒子。

β 磁谱仪 beta magnetic spectrometer　利用 β 粒子在磁场中偏转的大小与其动量有关的原理测量 β 粒子能量的仪器。它具有高分辨率(10^{-4})和高精度(10^{-5}),可对 β 粒子的能量作绝对测量。

α 磁谱仪 alpha magnetic spectrometer　利用 α 粒子在磁场中偏转的大小与其动量有关的原理测量 α 粒子能量的仪器。它的分辨率可达 10^{-4}。由于 α 粒子的质量远大于电子质量,所以 α 磁谱仪所需的磁场较强。

γ 谱仪 gamma-ray spectrometer　测量 γ 射线能量的仪器。大致可分为四类:(1)闪烁能谱计,即带有快速电子线路,以便测量入射粒子能量的闪烁探测器;(2) 半导体探测器;(3) 磁谱仪,它通过测量 γ 射线所产生的次级电子的能量,来推算 γ 射线的能量;(4)通过测量 γ 射线的波长来计算其能量,即弯晶体 γ 谱仪。

质谱仪 mass spectrometer　分析各种元素的同位素并测量其质量及含量百分比的仪器。它由离子源、分析器和收集器三部分组成。其工作原理是将要研究的同位素的物质在离子源中形成离子,当它们经过分析器时,具有相同能量而质量不同的同位素在恒定磁场的作用下偏转不同,各循不同路径到达收集器,从它们到达收集器的位置和强度就可求得各同位素的质量和含量百分比。质谱仪不仅用于同位素分析,而且广泛地用于微量固体分析、有机化学分析、气体分析、真空检测和检漏等方面。

加速器 accelerator　利用电磁场使带电粒子不断地加速以获得有较高能量的装置。它由离子源(或电子枪)、加速聚焦系统和控制系统三部分组成。加速器类型按能量大小可分为低能加速器(能量在 100MeV 以下)、中能加速器(能量在 100MeV～1GeV 之间)和高能加速器(能量在 1GeV 以上);按粒子运动的轨道可分为直线形加速器和圆形加速器。低能加速器应用于研究低能原子核物理及工业和医疗等方面,中高能加速器则是中高能物理的研究工具。

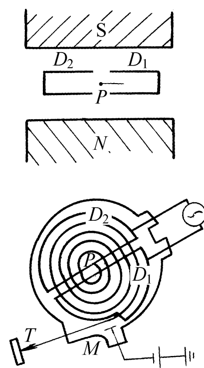
静电加速器 electrostatic accelerator　由范德格拉夫起电机使金属球壳产生静电高压并以此球壳作为电极产生的静电场来加速带电粒子的装置,称为静电加速器。被加速的带电粒子的能量等于球壳的电位和粒子的离子电荷的乘积。通常带电粒子可加速到 2～5MeV,束流强度为 10～100μA。其主要优点为能量的单色性高、可连续调节、稳定度高、粒子束聚焦性能好。静电加速器加速的粒子不仅可用于核物理的研究,也可用作能量范围为 1～2MeV 的 X 射线源。

高压倍加器 high voltage multiplier　又称考克饶夫-瓦尔顿加速器,一种静电型加速器。1932 年由考克饶夫-瓦尔顿(Cockeroft-Walton)首先制成。它使用一个变压器、一组整流管和一组电容器按电压倍加方式组成高压直流电源,以产生直流高压施加在真空加速管两端来加速电子、质子或氘核等粒子,粒子获得的能量等于加速管两端的电压乘以粒子的电荷。

由于受直流高压绝缘的限制，加速粒子能量上限在空气中为 1MeV，充以压缩气体绝缘后约为 2MeV。在核物理研究中，常利用高压倍加器加速的质子和氘核引起核反应来产生中子作为强中子源。

回旋加速器 cyclotron 利用稳定磁场使带电粒子作圆周运动，再利用磁场内电极间高频交变电场使带电粒子受到多次加速的设备(见图)。它主要由离子源 P、两半圆形中空 D 形盒、加在 D 形盒上的高频电源、产生稳定磁场的圆柱形电磁铁和致偏电极 M 组成。当带电粒子从离子源出来后，立刻受到 D 形盒间电场作用得到加速，然后进入 D 形盒内在强磁场作用下作圆周运动，由于盒内没有电场，粒子沿圆轨道折回空隙，在粒子越过空隙时又一次受到电场的加速进入另一 D 形盒内。只要交变电场的频率调节得当，使与粒子运动同步，使得粒子一次又一次地被加速，能量越来越高，粒子的回旋半径越来越大，最后在致偏电极的静电场作用下引出真空室，供研究之用。设带电粒子的电荷、质量和速度分别为 q、m 和 v，则在磁感应强度为 B 的磁场中作圆周运动的半径 $r=\frac{mv}{Bq}$，经半圆形轨道折回电极间隙所用时间 $t=\frac{\pi m}{Bq}$，回旋频率 $f_0=\frac{1}{2t}=\frac{Bq}{2\pi m}$。若选用交变电场频率 $f=f_0$，则粒子在加速器中不断地得到加速。最后获得动能 $E=\frac{B^2q^2}{2m}r^2=2\pi^2 f_0^2 mr^2$，其中 r 为加速器半径。对质子加速的最高能量为 20MeV 左右。普通回旋加速器的特点是束流强，主要用于加速质子、氘核和氦核等。但当被加速的带电粒子能量很高时，需考虑相对论效应。

同步回旋加速器 synchrocyclotron 普通回旋加速器的一种改进装置。普通回旋加速器的回旋频率 $f_0=\frac{Bq}{2\pi m}$，当被加速的带电粒子能量很高时，m 变大，f_0 变小，以至于当带电粒子还未到达电极间隙，交变电场就已改变了方向，结果电场不仅不能加速粒子，反而会使粒子减速。为此，必须设法使交变电场的频率成为可变的，使之与粒子的回旋频率 f_0 同步，这种加速器称为同步回旋加速器。还有一种办法是改变磁场 B 把被加速粒子的轨道由磁场控制在一个环形区域内，粒子由高频电场加速，磁场按直线上升，以补偿粒子质量的增大，使回旋频率 f_0 不变，以保持使高频电场对粒子的加速与粒子的转动同步，这样粒子从高频电场获得的能量正好使它们不断保持在主导磁场之中。



回旋加速器示意图

同步辐射 synchrotron radiation 高能带电粒子，特别是高能电子，在磁场中偏转时所发生的光辐射。高速电子在电子同步回旋加速器中作回旋运动时，沿着圆弧轨道的切线方向会发射出一种极强的光辐射，称为“同步辐射”或“同步光”。电子同步加速器起初都是为高能物理实验建造的，同步辐射是作为副产品加以利用的。20 世纪 60 年代末至 70 年代初先后建造了专门用于同步辐射的储存环。中国也于 80 年代初建造了合肥同步辐射装置。这些专门装置可以根据实验的要求调节储存环的工作状态，使之成为连续可调的光源。同步辐射具有强度大、光谱范围宽、方向性好、偏振性好、光的脉冲短、干净、波谱可准确计算等优点。因此在物理学、化学、生物学、材料科学、医学以及超大规模集成电路的光刻等方面得到广泛的应用。

自由电子激光 free electron laser 随着同步辐射技术的发展，利用插入技术和加速器技术，由加速器产生的相对论优质电子束通过插入件

(以扭摆磁铁作为振荡器)作振荡运动将其能量直接转换为激光,这就是自由电子激光。原则上讲,自由电子激光源可以覆盖从微波、红外、可见光、紫外直至X射线的一个很宽的电磁辐射波段。自1976年美国梅迪(Madey)等人研制成功世界上第一台自由电子激光装置以来,世界许多国家相继建造了自由电子激光装置,我国也建成北京自由电子激光装置并于1993年5月首次出束。

韧致辐射 bremsstrahlung 电磁场使带电粒子动量改变时发射的电磁辐射。韧致辐射的能量与带电粒子的能量有关。当用高能电子轰击重核时,电子能量的极大部分转变为韧致辐射能量。这种韧致辐射是能量从零到最大(约为入射电子能量)的连续γ射线。如果一部分γ射线的能量大于靶核(γ,n)反应阈能,便能通过(γ,n)反应产生中子。韧致辐射还有许多其他应用,主要能提供高能连续谱γ射线源。

电子感应加速器 betatron 由放在两个电磁铁之间的真空室组成,通过改变磁场而产生感应电场使真空室内的电子受到加速的装置。由于电子在环形轨道上加速运动时产生的辐射所引起的能量损失随电子能量的增加而增加,从而使电子获得的动能受到限制,最高约为300MeV。这种加速器构造简单,造价低,可用于工业探伤、辐照改性和医疗等。

电子直线加速器 electron linear accelerator 利用在波导管内传导的行波使电子持续地加速的设备。可以设计的使电磁波在波导管内沿轴向分布,行波的速度与电子速度一致,电子被这个波的电场加速并随波前进。电子经过一米长的波导管可使电子能量增加10~15MeV。电子束流是脉冲式的,平均流强达几十微安。束流的注入和引出都较方便,电子作直线运动,实际上没有辐射损失。

质子直线加速器 proton linear accelerator 一种加速质子的直线型谐振加速器,其结构是在一个大圆筒里有一系列一个比一个长的称为漂移管的铜管电极排成一直线,质子在漂移管内匀速运动,每当它通过漂移管间隙时就不断地被加速。质子直线加速器束流强度大(脉冲流强可达100mA左右),注入和引出方便,灵活性大,可按需要通过加长长度而提高能量,在高能物理中一般作为圆形加速器的注入器。

介子工厂 meson factory 20世纪60年代初在美国洛斯·阿拉莫斯建成的800MeV质子直线加速器(简称LAMPF),脉冲流强达千毫安,可产生很强的介子流。由于介子在医学、中子武器和固体研究中有各种用途,所以把能产生强大π介子流的加速器以及有关应用和实验设备,称为介子工厂。

超导加速器 superconducting accelerator 泛指使用超导技术的直线、回旋或同步加速器。超导直线加速器用超导谐振腔或波导(用铌或其他超导材料制成并在低温下工作)代替一般谐振腔或波导以提高单位长度的场强,即提高加速效率。超导回旋加速器与超导同步加速器主要用超导材料(铌钛丝)绕制的超导磁体产生所需要的磁场,以减少功能消耗,产生强磁场。

重离子加速器 heavy-ion accelerator 能够加速比α粒子更重的离子的加速器。这种加速器加速离子时大致可分三个阶段进行:预加速、电荷剥离和后加速。中国在20世纪80年代就已建成了兰州重离子加速器。

注入器 injector 串级加速器中的前级加速器。在高能质子加速器中一般是用200MeV或能量更低的质子直线加速器作为注入器。在加速器中因绝热阻尼作用使高能质子束的截面和角散度变得很小,因而只要很小的环形真空室就可加速这种粒子束。这样,可大大减轻磁铁重量,提高最后束流强度,改善束流性能。直线加速器的束流强,适合作注入器。

增强器 booster 串级高能加速器中主加速器和注入器之间,初次进行加速的加速器,称为增强器。增强器可以有一级或几级,一般都是用小的同步加速器作增强器。通过增强器的积累作用及粒子速度的初步提高,用来提高入射脉冲流强和入射能量,改善入射束流性能。

储存环 storage ring 一种较长时间(从几小时到几十小时)储存并积累高能稳定粒子以便实现对撞的环形装置。最早建成的电子-正电

子储存环，它以直线加速器或同步加速器作为注入器，在恒定磁场下多次入射电子（或正电子）以增强束流。电子和正电子在同一环形磁场的真空室里进行回旋，当粒子储存到足够强度后，在一定的直线节里使得两束粒子中心轨道重合，进行对撞、有些储存环既可以储存粒子，又可以加速粒子，实际上是一台同步加速器。

对撞机 colliding beam machine 使两束高速、反向运动的粒子流彼此以对方为靶而相互碰撞的高能物理实验装置。根据动量守恒，当加速器束流轰击一个静靶时，仅有一部分能量参与反应，另一部分能量则以动能形式由出射粒子和新产生的粒子带走，而且参与反应的有效能量百分率随入射束流能量的增大而减少，例如400GeV 的束流轰击静止靶，真正用于粒子反应的有效能量只占7%。当两束反向运动的粒子流相碰撞，则两束流的能量可全部用于粒子反应。根据相对论，两个质量为 m 动能为 T 的粒子对撞，有效能量为质心系的总能量 $E=2T$，而如果一个粒子静止，另一个粒子一定要有 $E'=E^2/2mc^2$ 的能量才能达到同样大小的有效能量。例如要达到有效能量 $E=540\text{GeV}$，对于质子 $mc^2=0.938\text{GeV}$，则 $E'=1.6\times10^5\text{GeV}$，这表明两个270GeV 的质子对撞相当于一个 1.6×10^5GeV 质子与静止靶中的质子相撞。这样，就可以用现有能量的加速器实现超高能物理实验。目前，对撞机大多是用储存环把进行对撞的粒子加速到最终能量后储存在一个环内（对电荷相反的粒子，如质子-反质子、电子-正电子）或两个环内（对电荷相同的粒子，如质子-质子），以实现电子-正电子、质子-反质子或质子-质子对撞。意、美和西欧先后建成了电子-正电子对撞机、质子-反质子对撞机和质子-质子对撞机。中国也于20世纪80年代末建成了北京正负电子对撞机，开展高能物理实验研究。

亮度 luminosity 描述对撞机中粒子束性能的一个量。亮度等于对撞机上每秒钟发生某一反应的次数除以这一反应的反应截面。粒子束流越强越细，则亮度也就越大。对于质子束流，设各束粒子数为 N_1，N_2，回转频率为 f，束流截面为 S，则质子束的亮度 L 为

$$L=\frac{N_1N_2f}{S}$$

束流 beam current 在加速器中成束运动的粒子流。单位时间通过某一截面的粒子数称为束流强度。由于被加速的粒子一般为荷电粒子，因而也用毫安、微安来表示束流强度。在高能加速器中，因束流太弱，常用每一束流含有多少个粒子数来表示束流强度。一微安的质子束流相当于每秒 6.25×10^{12}个质子。

束流冷却 beam cooling 一种减少在加速过程中粒子束的横向发散度和能散度的技术。若粒子束中一部分粒子偏离设计轨道和平均能量，则表明各粒子相对其平均速度和轨道作不规则运动，偏离越大，不规则运动的动能也越大，相当于粒子束的温度越高。减少这种不规则运动相当于粒子束“冷却”。冷却方法有电子冷却和随机冷却。电子冷却是利用入射电子流与粒子碰撞作用把粒子的部分动能传给电子束来冷却反质子或其他重离子，1976年在一质子储存环上进行了电子冷却实验。随机冷却是通过测量粒子束在某一截面上粒子流重心，再用测量点后不远处的电场使粒子流重心逐渐恢复到设计轨道上去，1983年西欧核子研究中心的质子-反质子对撞机上利用随机冷却技术获得高品质的质子、反质子束，以致发现了中间矢量玻色子。为此，随机冷却技术的发明人范德梅尔和建造质子-反质子对撞机的负责人鲁比亚荣获1984年诺贝尔物理奖。

Solid State Physics
固体物理学

一、概 论
Introduction

固体物理学 solid state physics 固体物理学是物理学的一个重要分支,它研究固体的微观结构和宏观物理性质以及它们之间的相互关系。它所研究的主要范围是:晶体和非晶态固体的结构;电子、原子或离子的运动规律及其相互关联;各种不同性能的固体材料(包括半导体、金属、电介质、绝缘体、超导体、磁性材料、光学材料等)的性质;新型人工功能材料的微观结构和宏观性质;固体理论等。近半个世纪以来,固体物理学获得了很大的发展,并为促进微电子学、光学材料、磁性材料、超导材料、激光、计算机硬件、新型材料等高新技术领域的发展起了很大的作用。近年来固体物理学在高温超导体、纳米材料、新型磁性材料、新型激光和非线性光学材料、计算机材料设计、量子点、量子阱和超晶格、准晶和非晶材料等研究领域又获得重要的进展,引起了科学技术界和工业界的广泛重视。

固体理论 solid state theory 固体物理学中从理论上研究固体中微观粒子(电子、原子和离子)的基本运动规律以及它们与宏观性质之间相互关系的一个分支。固体理论从固体的微观结构出发,以量子理论和统计理论为基础,得出固体中微观粒子运动的基本规律以及对宏观性质所产生的影响,从而解释在固体中所发现的各种现象,并预言各种新型结构的材料的性质。自量子力学奠基以来,固体理论将量子力学的基本理论成功地应用于固体材料,在半导体理论、金属理论、超导理论、磁性理论等方面取得了一系列重大成果。现在,高温超导理论、强关联电子理论、纳米材料理论、非晶态理论等已成为固体理论研究的前沿课题。

静近似 static approximation 这是研究晶体中电子运动规律时常用的一种近似方法。晶体中存在大量的电子和晶格粒子,是一个复杂的多体系统。但在研究很多问题时,往往只要分别考虑电子的行为或晶格粒子的行为就可以了。由于晶格粒子的质量比电子的质量大得多,在研究电子的运动时,可以近似地把晶格粒子看做是静止在平衡位置不动,这样可以对电子的运动单独求解其薛定谔方程。这种近似方法称为静近似。

绝热近似 adiabatic approximation 这是将晶体中电子的运动与晶格粒子的运动分开的另一种方法。这一方法依然考虑到电子的质量比晶格粒子的质量小得多,但它与静近似不同的是,在研究电子的运动时,它认为电子能够紧紧地跟随运动着的晶格粒子,因此电子的运动与晶格粒子的瞬时位置有关。这样,在电子的运动方程中,晶格粒子的位置是以参数的形式出现的。反过来,在晶格粒子的运动方程中,电子系统的本征能量也以参数的形式出现。这种互相联立的方程系统一般通过平均场方法结合变分方法求解,或者通过自洽的方法数值求解。

单电子理论 one-electron theory 通过静近似或绝热近似将固体中电子的运动与晶格粒子的运动分开后,电子系统仍然是一个复杂的相互作用着的多粒子系统。大量的电子自由度使得问题很难求解。为了减少自由度的数目,我们只考察一个电子的运动,而将其他电子对该电子运动的影响用自洽场的形式体现出来,这样的理论框架即称为单电子理论。电子的能带就是在这样的框架下计算出来的。

有效质量近似 effective-mass approximation 在研究固体中载流子的运动时,将载流子作为自由电子(或自由空穴)来处理,但是将其质量用有效质量来代替,这种近似方法称为有效质量近似。由于自由电子的薛定谔方程十分简单,采用这种方法可以极大地减少计算的工作量。但由于引入了有效质量,又可以包含固

体能带结构的重要信息。

结合能 binding energy 晶体结合的强度由结合能来表示。把晶体拆分成单个的分子或原子所需做的功,或者由单个的分子或原子结合成晶体放出来的能量,称为结合能。

离子晶体 ionic crystal 离子晶体有以下特征:构成晶体的基本单元是离子,晶体的结合是靠正负离子之间的静电库仑力,因此其中一种离子的最近邻,必是异性的离子。

元激发 elementary excitations 从固体的微观结构来看,固体是由数量众多的电子、原子或离子所组成,这些粒子以一定的规律相互作用,从而形成一个巨大的多粒子体系。以量子力学作为基本的理论框架来处理这一多粒子体系,原则上可以求出系统哈密顿量的具有不同本征能量的本征量子态。其中,能量最低的量子态称为系统的基态。能量比基态稍微高一些,但仍然较低的一些量子态称为低能激发态。低能激发态相对于基态的能量一般在低温或室温所对应的热激发能的数量级范围内,因此对于固体在低温或室温下的性质起着决定性的作用。如果把系统的基态当做真空态来处理,通过量子力学的二次量子化手续,可以把从基态到低能激发态的激发过程看做是准粒子的产生过程。这里所产生的准粒子,也称为元激发,是固体微观理论所研究的一个重要对象。元激发(或准粒子)具有确定的能量和动量,因此具有量子力学观点下的粒子的基本特征,但它并不直接与固体中原有的单个粒子(电子、原子或离子)相联系,而是由固体的整体性质决定。不过,在一定的近似下,某些准粒子可以近似地看做由某单个粒子所产生的元激发,如准电子就是在其他粒子互作用的背景下单个电子的运动过程时所形成的准粒子图像,这时,电子的有效质量、电荷等基本的物理量都要在考虑其他粒子互作用的条件下进行重整化,形成所谓"穿衣"了的电子。而另外一些准粒子在一定的近似下可看做是由两个粒子所形成的激发,如库珀对是由两个电子相互吸引所形成的,激子是由电子-空穴对束缚形成的。再有一些准粒子则是由某一类或一类以上的粒子的集体激发所形成的,如等离激元是由固体中全体电子的集体密度振荡形成的,声子是由全体离子的振动形成的,磁振子则是由全体离子自旋系统的振荡形成的,等等。

和一般的粒子一样,元激发(或准粒子)按其统计性质来分类,也可以分为玻色子和费米子,如声子和磁振子是玻色子,准电子是费米子。应该指出的是,将准粒子分为费米子和玻色子是在一定的近似下才能做到的。在强关联电子系统中,有些元激发往往既不具有费米子的统计性质,又不具有玻色子的统计性质,而是满足某一类特殊的统计,这一类元激发(或准粒子)称为任意子。近年来,任意子的概念在高温超导理论和分数量子霍尔效应等研究中得到一定的重视。

准粒子 quasiparticles 见"元激发"。

准电子 quasi-electrons 见"元激发"。

激子 excitons 在半导体中,如果一个电子从满的价带激发到空的导带上去,则在价带内产生一个空穴,而在导带内产生一个电子,从而形成一个电子-空穴对。空穴带正电,电子带负电,它们之间的库仑吸引互作用在一定的条件下会使它们在空间上束缚在一起,这样形成的复合体称为激子。激子和自由的电子-空穴对的主要区别在于它具有一定的束缚能。激子的束缚能是指将激子中的电子和空穴分开所需付出的能量。激子和自由电子-空穴对都能重新复合而发光,因此在固体的光学性质中起重要作用。由于激子束缚能的存在,使得激子复合时发光的光谱谱线发生红移。

自由电子-空穴对 free electron-hole pairs 见"激子"。

激子的束缚能 binding energy of excitons 见"激子"。

任意子 anyons 见"元激发"。

等离激元 plasmons 在具有一定载流子浓度的固体系统中(如金属、具有一定载流子浓度的半导体等),由于载流子之间的库仑互作用,使得空间中一处载流子浓度的涨落,必将引起其他地方载流子浓度的振荡。这种以载流子浓度的振荡为基本特征的元激发,称为等离激元。很明显,等离激元并不与某一单个载

流子的运动相联系,它是载流子系统的集体激发,但它同样也具有能量、动量、色散关系等粒子的基本特征。等离激元对金属、半导体的电学和光学性质有着重要的影响。

库珀对 Cooper pairs 根据BCS超导理论,在超导体中,由于电子-声子间的互作用,使电子之间产生有效的吸引互作用,从而使电子相互配对,这种在超导体中配对的电子,称为库珀对。由于库珀对的存在,超导体中任何一种激发都必须克服库珀对的束缚能,从而在费米能级上产生能隙,这就是超导能隙。

强关联电子系统 strongly correlated electron systems 在一类固体物质中,由于电子和电子之间有很强的互作用,采用单电子近似已经不能很好地描述电子的运动,电子的运动表现出强烈的多体特征,往往要用多体的电子态才能得出较为可靠的结果。这样的电子系统称为强关联电子系统。现在公认的强关联电子系统有:氧化物高温超导体,分数量子霍尔效应系统,锰氧化物巨磁电阻材料等。现在对强关联系统所采用的哈密顿模型有:哈勃德模型,t-J模型,海森伯模型等。哈勃德模型是在电子运动的紧束缚模型加上电子-电子间在格点上的互作用,即

$$H = t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma}(a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^{+}a_{i\sigma}) + U\sum_{i}a_{i\uparrow}^{+}a_{i\uparrow}a_{i\downarrow}^{+}a_{i\downarrow}$$

这里 $a_{i\sigma}$是在格点 i 上具有自旋 σ 的电子的消灭算符,t 和 U 分别是近邻的跨越积分和格点上电子的库仑互作用。t-J 模型则是在紧束缚模型的基础上加上电子自旋间的关联

$$H = t\sum_{\langle i,j\rangle,\sigma}(a_{i\sigma}^{+}a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^{+}a_{i\sigma}) + J\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j$$

这里 $\boldsymbol{S}_i$ 是在第 i 个格点上电子的自旋。海森伯模型则只考虑自旋之间的关联

$$H = J\sum_{\langle i,j\rangle}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j$$

哈勃德模型 Hubbard model 见"强关联电子系统"。

***t*-*J* 模型 *t*-*J*model** 详见"强关联电子系统"。

海森伯模型 Heisenberg model 见"强关联电子系统"。

二、晶格结构 *Crystalline Structure*

原胞 primitive cell 在完整晶体中,晶格在空间的三个方向上都具有一定的周期对称性(这三个方向可以不互相垂直),这样,可以取一个以结点为顶点,边长等于这三个方向上的周期的平行六面体作为最小的重复单元,来概括晶格的特征。这样的重复单元就称为原胞。

原胞基矢量 basis vector of primitive cell 原胞为平行六面体,从其顶点出发的三个边长及其对应的方向,构成了原胞的三个基矢量,可记为 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$。

单晶 single crystal 由原胞按周期性在空间规则排列所得到的晶体结构称为单晶。单晶中的原胞是单晶晶格结构的最小可重复单元,它是由一个或多个同种或不同种的原子、分子或离子组成。有自然形成的单晶,如天然金刚石,也有人工制备的单晶,如单晶硅。单晶中由于晶轴的存在,往往表现出各向异性。

多晶 polycrystal 由大量小的单晶体混乱堆积而成的固体称为多晶。多晶保留了单晶的基本性质。但由于大量小单晶体的混乱排列,在其总体性质上表现出各向同性。

晶粒 grain 组成多晶的每个小单晶体称为晶粒。

晶界 grain boundary 在多晶体中各个晶粒之间的交界区域,称为晶界,由于晶界是不同取向的小单晶体间的过渡区域,因此有较多的晶格缺陷,其厚度与材料的种类及多晶体的制备过程有关,多数为几个原子间距。

晶面 crystal plane 通过晶格中三个不在同一直线上的格点的平面称为晶面。

晶轴 crystal axes 晶格中的原胞在空间进行周期性重复排列的三个方向,称为晶轴。

米勒指数 Miller indices 米勒指数是用来标记晶面的指数。设相邻两个平行晶面在三个晶轴($\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$)上的截距为($la$, mb, nc),这里

a, b, c 为三个晶轴上的基矢量的长度，l, m, n 为整数，如将 l, m, n 的倒数通约为三个最小的互质的整数 i, j, k，即：

$$\frac{1}{l} : \frac{1}{m} : \frac{1}{n} = i : j : k,$$

则(ijk)为该晶面族的米勒指数。所有平行的晶面具有相同的米勒指数。

晶向指数 crystalline orientation indices 晶向指数是用三个整数来标定晶体内某一矢量的方向，记做[l, m, n]，其所标定的向量在三个晶轴(a, b, c)上的方向分量为(la, mb, nc)。

晶系 crystal systems 如果将晶体结构按三个原胞基矢量的长度 a, b, c 以及它们之间的夹角 α, β, γ(α 是 $\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}$ 间夹角，β 是 $\boldsymbol{c}, \boldsymbol{a}$ 间夹角，γ 是 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}$ 间夹角)来分类，可以分为七类，每一类称为一个晶系。这七个晶系分别是：立方晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a = b = c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = \gamma = 90°$；六角晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a = b \neq c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$；三角晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a = b = c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90°$；四方晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a = b \neq c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = \gamma = 90°$；正交晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a \neq b \neq c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = \gamma = 90°$；单斜晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a \neq b \neq c$，三个角度满足关系 $\alpha = \beta = 90° \neq \gamma$；三斜晶系，三个原胞基矢量满足关系 $a \neq b \neq c$，三个角度满足关系 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90°$。

立方晶系 cubic system 见“晶系”。

六角晶系 hexagonal system 见“晶系”。

三角晶系 trigonal system 见“晶系”。

四方晶系 tetragonal system 见“晶系”。

正交晶系 orthorhombic system 见“晶系”。

单斜晶系 monoclinic system 见“晶系”。

三斜晶系 triclinic system 见“晶系”。

点群 point group 晶体中至少有一点(对称元素相交的点)为不动的晶体宏观对称操作的集合，称为点群。晶体宏观对称操作包含旋转、镜像反映、空间反演和它们的组合。可以证明所有这些宏观对称操作的集合共有 32 种，每一种集合都符合群的定义。

平移群 translation group 晶体中的平移对称操作的集合称为平移群。由于晶格空间周期性加于平移对称操作上的限制，平移对称操作的所有可能的不同集合共有 14 种，每一种集合都符合群的定义。

空间群 space group 晶格中所有宏观对称操作和微观对称操作的集合称为空间群。由于晶格空间周期性的限制，对称操作的所有可能的不同集合共有 230 种，每一种集合都符合群的定义。

简立方晶格 simple cubic lattice 原胞是正立方体，且仅在立方体的顶点上有格点，面上和立方体内没有格点的晶格称为简立方晶格。

体心立方晶格 body-centered cubic lattice 以简立方晶格为基础，在每个正立方体的中心增加了一个格点所形成的晶格称为体心立方晶格。

面心立方晶格 face-centered cubic lattice 以简立方晶格为基础，在每个正立方体的面的中心增加了一个格点所形成的晶格称为面心立方晶格。

固溶体 solid solution 把一种元素 A 的原子加到由另一种元素 B 的原子所组成的固体中，其晶格结构保持不变，只是由元素 A 的原子部分地替代原来由元素 B 的原子所占据的位置，这样形成的固体称为固溶体。

倒易格子 reciprocal lattice 每个晶格都对应着一个倒易格子(也称“倒格”)，它也是一个具有周期性的空间点阵。它也有三个基矢量，其方向是晶格晶面簇的法向，其模量是晶面簇面间距的倒数。

倒格基矢 primitive reciprocal vector 晶格所对应的倒格的基矢量，称为倒易格子基矢，记为 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$。它们与原胞基矢量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 之间的关系是

$$\boldsymbol{b}_1 = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\Omega},$$

$$\boldsymbol{b}_2 = \frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\Omega},$$

$$\boldsymbol{b}_3 = \frac{\boldsymbol{a}_1 \times \boldsymbol{a}_2}{\Omega},$$

这里，$\Omega = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)$是原胞的体积。

倒格原胞 primitive cell in reciprocal lattice 倒易格子中的最小重复单元，称为倒格原胞。

无序 disorder 由于晶体中的杂质、畸变、位错及其他晶格缺陷的存在，使得晶格的对称性受到破坏，从而改变了晶体的基本性质。固体中这种破坏晶格对称性的物理因素，统称为无序。

孪晶 twin crystal 多个同种单晶通过一定的对称方式联结在一起所形成的晶体，称为孪晶。由两个相同的单晶通过一个反映面相联结的孪晶称为反映孪晶，该反映面称为孪晶面。反映孪晶由孪晶面在一个作为参考系的单晶中的晶面指数(hkl)作为孪晶符号，称为(hkl)孪晶。由两个同种单晶通过二次旋转轴联结而成的孪晶称为旋转孪晶，该旋转轴称为孪晶轴。旋转孪晶由孪晶轴在作为参考系的单晶中的指数[uvw]来标记，称为[uvw]孪晶。

非晶固体 non-crystalline solids, amorphous materials 晶格结构很不完整，或完全不具备晶格结构的固体，称为非晶固体。非晶固体包括一般的氧化物玻璃、金属玻璃、自旋玻璃、非晶半导体、非晶超导体等。由于这些材料不具备晶格的周期性，因此往往在力学性质、电学性质、磁性性质、光学性质、超导性质等方面，表现出与晶态材料极为不同的性质。例如，对非晶半导体电学性质的测量，可以看到很明显的由无序所引起的安德森局域化，而无序金属的导电性质则往往表现出弱局域化的性质。非晶材料不满足一般固体能带理论所要求的晶格周期对称性，对理论研究是一个新的挑战。

准晶体 quasicrystal 准晶体是一类不具备晶格的周期性，但仍然具有一定的长程有序性的固体材料。这种长程有序性在一个方向上往往以无理数序列的方式来表达，即这个序列像无理数一样是无限不循环的，因此没有严格意义上的周期，但它又是按一定的规则排列的，例如$\sqrt{2}$，其数码的排列是完全确定的。一个三维准晶体的典型例子是1984年Shechtman等制备的急冷Al-Mn合金的二十面体相。它可看做二十面体按一定的方式堆砌而成，因此在空间的三个方向都不具有周期性，但它的长程结构又是完全确定的。另一个例子是所谓的Fibonacci超晶格，它是用两种材料在一个方向上按Fibinacci序列的方式堆砌起来的层状结构，因此它在与层平行的方向上仍然有周期性，但在与层垂直的方向上不具备周期性。实际上，任何一个无理数的序列都可以用作构造准晶的依据。从其性质来看，准晶的电子谱和电子波函数往往表现出数学上的Cantor集合的性质，电子态的空间分布往往有自相似和复分形的性质，引起人们的广泛兴趣。

位错 dislocation 位错是晶格中原子平面相对移动所产生的线缺陷。设想有一个原子平面中断在晶格的内部，其一半完全失去了，而相邻的两个原子平面逐渐靠拢，来取代失去的部分，这样就形成了刃形位错。如果原子平面沿一根轴线盘旋上升，每绕轴线一周，原子平面上升一个晶格间距，在中央轴线处就形成了螺旋位错。很显然，刃形位错的线缺陷是原子平面的中断线，线缺陷和晶面位移间的夹角为90°，而螺旋位错的线缺陷是原子平面盘旋上升的螺旋轴，线缺陷和晶面位移间的夹角为0°。二者一般只影响到线缺陷的邻近区域。如果线缺陷和晶面位移间的夹角介于0°和90°之间，则这种位错称为混合型位错。

刃形位错 edge dislocation 见“位错”。

螺旋位错 screw dislocation 见“位错”。

混合型位错 mixed dislocation 见“位错”。

三、固体能带结构
Band Structures of Solids

布洛赫定理 Bloch theorem 对于完整晶体，在单电子近似的框架下，单电子的定态薛定谔方程可写成

$$[\hat{T}+V(\boldsymbol{r})]\psi_n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})=E_n(\boldsymbol{k})\psi_n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r}),$$

这里$\hat{T}$是动能算符，$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{r})$是自洽的单电子势能，$\psi_n(\boldsymbol{k},\boldsymbol{r})$是单电子本征波函数，$E_n(\boldsymbol{k})$是单电子本征能量。由于晶格的周期性，$V(\boldsymbol{r})$对于沿着格矢$\boldsymbol{R}(n_1, n_2, n_3)=n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+$

$n_3\boldsymbol{a}_3$ 的平移是不变的，这里 n_1, n_2, n_3 是整数，因此，本征波函数的模也应该是平移不变的，即

$$|\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{R})| = |\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})|,$$

于是，波函数本身应满足以下关系

$$\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = \lambda(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R})\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}),$$

这里 $\lambda(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R})$ 是模为 1 的复数，即 $\lambda(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R})$ 可写成 $\lambda(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R}) = e^{i\theta(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R})}$。根据平移对称性的特点，两个格矢为 $\boldsymbol{R}_1$ 和 $\boldsymbol{R}_2$ 的平移操作等价于一个格矢为 $\boldsymbol{R}_1+\boldsymbol{R}_2$ 的平移操作，因此 $\theta(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{R})$ 应是 $\boldsymbol{R}$ 的线性函数。我们把比例系数作为布洛赫波矢 $\boldsymbol{k}$，根据晶格的周期对称性，它应是好量子数。于是我们有

$$\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})。$$

反过来，函数 $e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$ 在平移变换 $\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}$ 下应保持不变，我们把它记作周期函数 $u_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$，这样本征波函数应具有布洛赫函数的形式

$$\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$$

这里 n 是能带指标，能带的个数是由一个原胞之内单电子自由度的个数决定。这就是布洛赫定理，它是完整晶体能带理论和能带计算的基础。

波矢量 wave vector 波矢量是描述单色平面波运动特性的一个矢量。其方向为波传播的方向，其大小为波长倒数的 2π 倍。在固体中，波矢量是描述电子、声子或其他准粒子及元激发的波动性的矢量。在具有周期对称性的完整晶体中，波矢量是描述粒子运动的好量子数。根据布洛赫定理，在周期场中运动的电子，其波函数可以写成布洛赫函数的形式

$$\psi_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}u_n(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r})$$

这里 $\boldsymbol{k}$ 是波矢量，$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ 为空间坐标 $\boldsymbol{r}$ 的周期函数，而 n 是能带的指标。根据量子力学，波矢量和动量 $\boldsymbol{p}$ 之间有如下关系：

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

式中，$\hbar = h/2\pi$，h 是普朗克常数。

布洛赫函数 Bloch function 见“波矢量”。

周期性边界条件 periodic boundary conditions 对于有限大小的晶体而言，电子的波矢量应取离散值，其具体数值与所取的边界条件有关。周期性边界条件是为了模拟无限延展的晶体而普遍采用的边界条件。设想晶体为一个在三个基矢方向的边长分别为 L_1, L_2 和 L_3 的立方体，波函数的模在两个相对的壁上相等，根据布洛赫定理，在这样的边界条件下，波矢量在三个倒格矢 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ 方向上的分量在第一布里渊区内应取的离散的值

$$k_1 = \frac{2\pi}{L_1}n_1, n_1 = 0, 1, 2, \ldots, L_1,$$

$$k_2 = \frac{2\pi}{L_2}n_2, n_2 = 0, 1, 2, \ldots, L_2,$$

$$k_3 = \frac{2\pi}{L_3}n_3, n_3 = 0, 1, 2, \ldots, L_3,$$

这种边界条件称为周期性边界条件，又称为玻恩-卡曼(Born-Karman)条件。

玻恩-卡曼条件 Born-Karman boundary conditions 见“周期性边界条件”。

能带 energy band 在研究单个电子在固体中的运动规律的能带理论中，电子的能级可以分为许多组，每一组均由大量的密集的连续或准连续的能级所组成，这样的能级的组，即称为能带。一般能带填充了某些连续的能量区域，而没有被能带所填充的能量区域，则称为禁带，如下图所示。在完整的周期性晶格结构中，固体的每个能带中的电子能量是波矢量的连续周期函数，可以表达为

$$E_n(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}) = E_n(\boldsymbol{k})$$

这里 n 是能带的标号，$\boldsymbol{k}$ 是波矢量，$\boldsymbol{G}$ 是倒格矢，它可表达为倒格基矢 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3$ 的整数倍：

$$\boldsymbol{G} = l\boldsymbol{b}_1 + m\boldsymbol{b}_2 + n\boldsymbol{b}_3。$$

不同的能带可以在能量上相互分开,但也有可能在某些能量区域互相重叠,但相同的能量一般对应着不同的波矢。

对于非周期性的或不完整的晶格,波矢量 $\boldsymbol{k}$ 不再是好量子数,电子能量也不能表达为波矢量的函数,但这时能带依然存在,它表示电子能量可以连续取值的范围。

每种固体都具有其独特的能带结构。能带结构中包含有大量的晶体中单电子运动的信息,是研究固体材料性质的重要的微观理论。但由于其基础是单电子近似,因此不能对具有强互作用的系统(强关联系统)给出好的描述。

带宽 band width 一个能带的两个能量边界,称为带边,其中能量的上边界称为带顶,能量的下边界称为带底。带顶和带底之间的能量间隔,称为带宽。

带边 band edge 见“带宽”。

带顶 band top 见“带宽”。

带底 band bottom 见“带宽”。

禁带 forbidden band 见“能带”。

能隙 energy gap 相邻两个能带间的最小能量间隔,也即禁带宽度,又称带隙。

空带 empty band 如果固体中的一个能带中的所有的单电子态都没有电子占据,这一能带即称为空带。

满带 filled band 如果固体中的一个能带中的所有的单电子态都被电子占据,这一能带即称为满带。根据量子力学的泡利不相容原理,满带不能再容留新来的电子。

价带 valence band 固体中一般都有多个能带。价带是有电子占据的能量最高的能带。对于金属导体,其价带没有被电子所完全占满,价带中的电子是可以导电的,因此也称为导带。而对于本征半导体和绝缘体,其价带在绝对零度下是被电子完全占满的,因此不能导电。对于半导体来说,可以通过掺杂或热激发的方法,使价带失去一部分电子,或者使能量比价带更高的一个空的能带得到一些电子,这时这个能量更高的能带即称为导带,导带中的电子是一种载流子,价带中空出来的电子态是另一种载流子,称为空穴,这两种载流子使得这时的半导体可以导电。

导带 conduction band 见“价带”。

载流子 carriers 固体中可以传输电流的粒子。金属中,导带中的电子是载流子;掺杂或热激发的半导体中,价带中的空穴或导带中的电子是载流子。见“价带”。

空穴 holes 见“价带”。

电子态密度 density of states of electrons 在单电子理论的框架下,单电子能量介于 E 与 $E+\mathrm{d}E$ 之间的单电子量子态数 $\mathrm{d}N$ 与能量间距 $\mathrm{d}E$ 之比,称为在能量 E 上的电子态密度。在绝对零度下,对一个孤立系统,其态密度可以用下式计算

$$\int_E^{E+\delta E}\rho(E')\,\mathrm{d}E' = \sum_{i\in(E+\delta E>E_i>E)} 1$$

这里 i 是该系统所有独立的单电子量子数。要注意的是,对于无序系统,布洛赫波矢不再有意义,但依上式算出的态密度仍有意义,它反映出系统电子态的能量分布。

范霍夫奇点 Van Hove singularity 态密度作为能量的函数,一般是连续的。但在个别的能量点上,态密度有可能出现奇异性,这些点称为范霍夫奇点。二维紧束缚模型在半满时费米能级就是处在范霍夫奇点上。

***k* 空间 *k* space** 对于完整晶体而言,电子的波矢量 $\boldsymbol{k}$ 是好量子数,因此可以用波矢量 $\boldsymbol{k}$ 来描述电子的运动状态。以波矢量 $\boldsymbol{k}$ 的三个分量为直角坐标则形成一个波矢空间,也称 $\boldsymbol{k}$ 空间。

费米能级 Fermi level 在单电子理论的框架下,在能量为 E 的单电子量子态上的平均电子数为

$$\langle n\rangle = \frac{1}{\mathrm{e}^{(E-\mu)/k_BT}+1}$$

这里 T 为绝对温度,k_B 为玻尔兹曼常数,μ 为化学势。在绝对零度下,所有能量小于 μ 的量子态都被占据,而所有能量大于 μ 的量子态都是空的,这时系统的费米能级 $E_F=\mu$。在有限温度时,处于化学势附近的电子对固体的输运性质起着重要的影响。必须指出的是,化学势不一定是允许的单电子能级,例如在半导体中,化学势可以处于禁带中。

赝势法 pseudopotential method 在晶体能

带计算中,一个困难的问题是在靠近原子核的区域,原子核对电子的吸引势能非常强烈,使得电子的波函数发生剧烈的振荡,从而大大降低了计算的精确度。然而实际上对于固体材料,人们感兴趣的是价电子态在原子核的间隙区运动的情形,在这个区域,波函数还是比较平滑的。因此,可以构造出一个一个平滑的波函数 $\varphi(\boldsymbol{r})$,它与真实的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$之间的关系是

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \varphi(\boldsymbol{r}) + \sum_c b_c \varphi_c(\boldsymbol{r})$$

这里 $\varphi_c(\boldsymbol{r})$是原子核心态的波函数,系数 b_c 可由 $\psi(\boldsymbol{r})$与 $\varphi_c(\boldsymbol{r})$正交的条件决定。将其代入薛定谔方程,可以得到作用在平滑波函数 $\varphi(\boldsymbol{r})$上的势能为

$$V_p = V + \sum_c (E - E_c) \times | \varphi_c \rangle \langle \varphi_c |,$$

这里 V 是原来的势能。可以看到,上式的后面一项是正的,因为核心态的能级 E_c 总是比价电子的能级为低,而且它集中在核心区,从而抵消了原来势能中在核心区的很强的负的部分,使得 V_p 在整个空间都很平缓。V_p 称为赝势,$\varphi(\boldsymbol{r})$称为赝波函数。这种方法解决了原子核心区的波函数强烈振荡的问题,称为赝势方法。

赝波函数 pseudo wave function 见“赝势法”。

简并 degeneracy 在固体中,有两个或两个以上的量子态具有相同的能量,称为简并。具有相同能量的量子态的个数,称为简并度。

费米温度 Fermi temperature 电子的费米能级 E_F 与玻尔兹曼常数 k_B 之比,称为费米温度。

等能面 equal-energy surface 对于完整晶体而言,具有某一相同能量的电子态在 $\boldsymbol{k}$ 空间的代表点所构成的曲面,称为对应于该能量的等能面。

费米面 Fermi surface 在绝对零度时,对于完整的金属晶体而言,对应于费米能级的等能面称为费米面。在绝对零度下,费米面是 $\boldsymbol{k}$ 空间中被占据态和非占据态的分界面。

布里渊区 Brillouin zone 在晶格周期场中电子的波函数具有布洛赫函数的形式

$$\psi_k(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} u_k(\boldsymbol{r})。$$

可以证明 $\boldsymbol{k}$ 态和 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ 态是完全等价的。这里 $\boldsymbol{K}$ 是 $\boldsymbol{k}$ 空间中的倒格矢,它可用倒格基矢来表达

$$\boldsymbol{K} = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3$$

这里 m_1, m_2, m_3 是整数。这样,在 $\boldsymbol{k}$ 空间中对所有从原点出发的倒格矢作垂直平分面,由这些面相交围成的 $\boldsymbol{k}$ 空间的各个小区域即称为布里渊区。每个布里渊区所包含的波矢量数目等于晶体的原胞数,也即包含了全部电子态在 $\boldsymbol{k}$ 空间中的代表点。包含原点的布里渊区称为第一布里渊区,又称为简约布里渊区,该区内的波矢量称为简约波矢量。对于完整晶体,任何态均可在第一布里渊区内找到其波矢的代表点,因此通常都在第一布里渊区内进行讨论。

第一布里渊区 the first Brillouin zone 见“布里渊区”。

简约布里渊区 reduced Brillouin zone 见“布里渊区”。

简约波矢量 reduced wave vector 见“布里渊区”。

有效质量 effective mass 固体中的载流子在外力的作用下,其外力与加速度之间的比率,称为有效质量。对于接近于带边的载流子,载流子的有效质量的倒数等于能量对波矢量的二阶微商再除以 $\hbar^2$($\hbar = h/2\pi$)。对于一般的晶体而言,有效质量是个张量。有效质量不同于自由电子的质量,它是由电子在晶体周期势下的运动状态所决定的。

安德森局域化理论 Anderson localization theory 在无序存在的条件下,电子波函数受到杂质和缺陷的散射,形成大量具有不同振幅和相位的散射波,这些散射波互相干涉,使得电子的波函数发生本质的变化。安德森在1958年证明,在有无序存在时,固体中有一部分电子态局域在空间的某一范围内,其波函数随着距离的增大而指数衰减;而其他电子态仍然可以扩展到整个空间。他把前者称为局域态,后者称为扩展态。由于局域态的波函数局

域在空间的一定范围内,因此局域态对固体的输运性质没有贡献,只有扩展态才能对输运性质有贡献。如果在费米面附近的电子态由于无序而发生从扩展态到局域态的转变,固体将会发生由无序引起的从金属到绝缘体的安德森转变,这是一种量子相变,其重要性已经引起了高度重视。

安德森转变 Anderson transition 见“安德森局域化理论”。

扩展态 extended states 见“安德森局域化理论”。

局域态 localized states 见“安德森局域化理论”。

四、晶格振动和声子 *Lattice Vibrations and Phonons*

格波 lattice waves 晶体中的原子围绕其平衡位置不停地振动,由于原子之间的相互作用,振动以波的形式在晶格中传播,就形成格波。在简谐近似下,晶格中的格波可以表达成如下的形式:

$$\boldsymbol{u}_{l,j} = \mathbf{A}_{\mathbf{k}} e^{i(\omega t - \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}_{l,j})}$$

这里 $\boldsymbol{u}_{l,j}$是第 l 个原胞中第 j 个原子的位移,$\boldsymbol{r}_{l,j}$是该原子的坐标,ω 是振动的频率,**k** 是波矢量。对应于一个确定的 **k**,ω 可以有 $3m$ 个解(m 为每个原胞中原子个数),也即对应于一个确定的 **k** 有 $3m$ 个振动模式。在具有 N 个原胞的晶格中共有 $3mN$ 个振动模式,这其中有 $3N$ 个声学模,$3(m-1)N$ 个光学模。声学模在 $\mathbf{k}\to 0$ 时,$\omega\to 0$。而光学模在 $\mathbf{k}\to 0$ 时,ω 为有限。

声学模 acoustical modes 见“格波”。

光学模 optical modes 见“格波”。

声子 phonons 格波的能量量子,称为声子。声子是玻色子,因此,对于一个格波模式,可以有多个声子。对于频率为 ω 的格波模式,每个声子的能量为 $\hbar\omega$。这就是说,随着声子数量的增加,该格波模式的能量以 $\hbar\omega$ 的倍数不连续地增加。这是与经典的情况不同的,在经典的情况下,格波的能量是随着振幅的增加而连续增加的。某一格波模式的平均声子数量,满足如下的玻色-爱因斯坦分布:

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}。$$

这里 T 为绝对温度,k_B 为玻尔兹曼常数。

德拜模型 Debye model 德拜把晶格的振动作为连续介质中的弹性波来处理,由此得出其振动频率与波矢量之间的线性关系。而对于有 N 个原子的晶体来说,其振动具有 $3N$ 个模式,占据了从 0 到 γ_m 之间的振动频率。据此模型按统计理论,可计算出固体的克原子内能为

$$U = 3RTD(\Theta_D / T),$$

式中,R 为气体常数,$\Theta_D = \dfrac{h\nu_m}{k_B}$称为德拜温度($h$ 为普朗克常数,k_B 为玻尔兹曼常数),ν_m 称为德拜频率,T 为绝对温度。$D(x)$称为德拜函数,

$$D(x) = 3x^3 \int_0^x \frac{y^3}{e^y - 1} dy。$$

由此,得出固体克原子比热公式为

$$C_\nu = 3Rf_D(\Theta_D / T),$$

这里,$f_D(x)$称为德拜比热函数,

$$f_D(x) = 3x^3 \int_0^x \frac{e^y y^4}{(e^y - 1)^2} dy。$$

由德拜模型得到的结果与实验数据较为接近,但不完全一致,实验发现 ν_m 与温度有关。这说明德拜模型只是一个较好的近似理论。

散射的正常过程 normal process of scattering 在晶体中,粒子之间的相互散射过程也要满足能量守恒和动量守恒定律。对于动量守恒来说,由于晶格的周期性,在晶格中波矢为 $\boldsymbol{q}$ 的状态与波矢为 $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{K}$ 的状态实际上是同一个状态(这里 $\boldsymbol{K}$ 是晶体的倒格矢),因此,如果两个粒子在散射前和散射后的动量分别为 $\boldsymbol{q}_1$, $\boldsymbol{q}_2$ 和 $\boldsymbol{q}'_1$, $\boldsymbol{q}'_2$,则这些动量在动量守恒定律的约束下,可以满足如下的关系

$$\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{q}'_1 + \boldsymbol{q}'_2,$$

但也可满足如下的关系

$$\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 = \boldsymbol{q}'_1 + \boldsymbol{q}'_2 + \boldsymbol{K}。$$

满足前一种关系的散射过程称为正常过程;满

足后一种关系的散射过程称为倒逆过程。散射的倒逆过程伴随着在周期性的晶格结构中所产生的布拉格反射，而倒格矢 $\boldsymbol{K}$ 则是布拉格反射所对应的波矢改变量。

散射的倒逆过程 umklapp process of scattering 见“散射的正常过程”。

布拉格反射 Bragg reflection 见“散射的正常过程”。

五、电介质与铁电体

Dielectric Media and Ferroelectric Materials

电介质 dielectric 在外加电场的作用下极化强度会发生变化的物质称为电介质。

介电常数 dielectric constant 在电介质中，电位移矢量 $\boldsymbol{D}$ 和外加电场强度 $\boldsymbol{E}$ 之间有如下关系：

$$\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}$$

这里 ε_0 为真空介电常数，$\boldsymbol{P}$ 为极化强度，它与外加电场的关系为

$$\boldsymbol{P}=\chi\varepsilon_0\boldsymbol{E}$$

χ 是介质的极化率。因此电位移矢量和电场强度的关系可写成

$$\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$$

这里 $\varepsilon=\varepsilon_0(1+\chi)$ 称为介电常数。

在交变电场的情况下，介电常数可为复数，其辐角表征电位移矢量和外加电场间的位相差。介电常数的实部和虚部都是重要的物质常数，前者是引起色散现象的度量，后者表征介质损耗。

铁电性 ferroelectricity 某些电介质晶体在外加电场为零时仍然具有非零的电极化强度，这种自发极化特性称为铁电性。

反铁电性 antiferroelectricity 内部存在自发极化强度大小相等，方向相反的两种子晶格的固体称为反铁电体，相应的自发极化特性为反铁电性。

压电性 piezoelectricity 有些晶体在应力的作用下会产生极化强度的变化，这种特性称为压电性。

六、磁学性质

Magnetic Properties

固体磁矩的有序排列 order of magnetic moments in solids 固体中的电子和多数离子都具有磁矩。一般来说，外加磁场会迫使这些磁矩沿着磁场的方向排列。如果在没有外加磁场的条件下，固体中所有电子和离子的磁矩都是无规排列的，则固体表现出的总磁矩为 0，我们称这样的固体具有顺磁性。见“顺磁性”。如果在没有外加磁场的条件下，固体中所有电子和离子的磁矩在低温下（温度小于居里温度）基本上仍沿相同的方向排列，固体表现出的总磁矩不为 0，我们称这样的固体具有铁磁性。这时，固体的磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 和外加磁场 $\boldsymbol{B}$ 之间有如下关系：

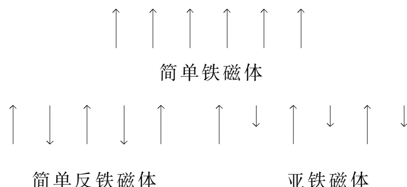
$$\boldsymbol{M}=\chi\boldsymbol{B},$$

这里 χ 是磁化率。

如果在没有外加磁场的条件下，固体中所有电子和离子的磁矩在低温下（温度小于居里温度）基本上仍沿相同的方向排列，固体表现出的总磁矩不为 0，我们称这样的固体具有铁磁性。见“铁磁性”。

如果在没有外加磁场的条件下，固体中所有离子的磁矩在低温下（温度低于奈尔温度）基本上沿正反相间的方向排列，固体表现出的总磁矩虽然为 0，但局部的磁矩有正反的变化，我们称这样的固体具有反铁磁性。见“反铁磁性”。

如果固体中有两种不同磁矩的离子，在没有外加磁场的条件下，这两种离子的磁矩在低温下基本上沿相反的方向排列，固体表现出的总磁矩不为 0，且局部的磁矩有正反的变化，我们称这样的固体具有亚铁磁性。见“亚铁磁性”。下图说明了固体中不同的磁有序性：



磁振子 magnon 在铁磁体、反铁磁体等在低温下具有磁序的固体材料中，有一类元激发是由磁性原子(或离子)的磁矩在铁磁序(或反铁磁序)的平衡位置附近发生振荡而引起的，这一类元激发称为磁振子。由于铁磁体和反铁磁体中原子(或离子)的磁矩是相互耦合在一起的，一个原子(或离子)的磁矩的振动必将引起相邻原子(或离子)的磁矩的振动，从而像波一样传播开来。因此，磁振子和声子一样，具有一定的能量和动量，且能量和动量之间具有一定的关系，称为磁振子的色散关系。例如，对一维的铁磁链，其哈密顿量可表示成

$$H=-2J\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_{i+1}$$

这里 J 是交换积分，$\boldsymbol{S}_i$ 是第 i 个格点上的磁矩。这时磁振子的色散关系为

$$\hbar\omega=4JS(1-\cos ka)$$

这里 a 是晶格常数，k 是布洛赫波矢。

在低动量下单位动量的增加所引起的能量增加数值，称为磁振子的刚度，它反映了该种磁性材料的磁振荡的“软硬”程度。一般原子(或离子)间磁性耦合越强，其磁振子的刚度就越大。

磁振子的色散关系 dispersion relation of magnons 见“磁振子”。

磁振子的刚度 stiffness of magnon 见“磁振子”。

近藤效应 Kondo effect 如果在金属中有磁性杂质，由于杂质的磁矩的交换互作用对传导电子有散射作用，而且这种散射随温度的降低而加强，与晶格振动所引起的散射正好相反，从而引起金属电阻在10K数量级的低温下出现一个平缓的极小值，这种现象称为近藤效应。

整数量子霍尔效应 integer quantum Hall effect 1980年，范·克里金在由半导体反型层所构成的二维电子气中测量了与平面垂直的强磁场下霍尔电阻张量的两个分量 ρ_{xx} 和 ρ_{xy} 随二维电子气中电子浓度变化的关系，发现在浓度变化的过程中，周期性地出现 $\rho_{xx}=0$ 的点，并且在这些点附近，ρ_{xy} 在一定的浓度范围内保持不变，也即出现了Hall电阻的平台，这些平台所对应的Hall电阻数值为 $\rho_{xy}=\frac{ie^2}{\hbar}$，这里 i 为整数。这种效应称为整数量子霍尔效应。其物理机制为：在与平面垂直的强磁场的作用下，二维电子气的能谱分裂成分立的朗道能级，由于系统中无序和缺陷的存在，朗道能级变宽，相邻能级间的能量区域出现局域态，当载流子的浓度正好能填满整数个朗道能级后，再增加的载流子浓度只能填充局域态的轨道，对电流无贡献，因此 ρ_{xy} 不再变化而出现Hall平台，与此同时出现 $\rho_{xx}=0$ 的点。当载流子浓度继续增加达到下一个朗道能级时，ρ_{xy} 发生跳跃而到达下一个Hall平台。这样，随着载流子浓度的变化，周期性地出现 $\rho_{xx}=0$ 的点和 ρ_{xy} 的Hall平台。

分数量子霍尔效应 fractional quantum Hall effect 继范·克里金在由半导体反型层构成的二维电子气中发现整数量子霍尔效应之后，崔琦等对Ⅲ-Ⅴ族化合物 $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ 异质结在更低的温度和更高的磁场下的Hall电导进行测量，除了看到对应于整数量子霍尔效应的Hall平台(见“整数量子霍尔效应”)外，还发现在另外一些载流子浓度值附近出现 ρ_{xy} 的新的Hall平台，这些平台对应的Hall电导的值为 $\rho_{xy}=\frac{ve^2}{\hbar}$，这里朗道填充因子 v 不是整数，而是如同1/3,2/3,4/3,5/3,2/5,3/5,4/5,2/7等分数，这种效应称为分数量子霍尔效应。在理论上，Laughlin在研究二维系统中电子和电子互作用的基础上，提出Laughlin波函数，用以描述电子系统的基态，其中出现了统计性的电子分数占据的能级，相当于一种不可压缩的量子流体。

德哈斯-范阿尔芬效应 de Hass-van Alphen effect 德哈斯-范阿尔芬效应是金属在低温及强磁场下所观察到的磁化率中所存在的与磁场有关的振荡部分。它是德哈斯和范阿尔芬于1930年在Bi单晶中首次观察到的。在绝对零度(或极低温下)，金属的传导电子的磁矩 $M=-\frac{\partial E}{\partial H}$，这里 E 是传导电子的能量，与费米面有关。在没有磁场时，费米面是连续的球面，对于最简单的自由电子，可以由下式决定

$$E_F=\frac{\hbar^2}{2m^2}(k_x^2+k_y^2+k_z^2),$$

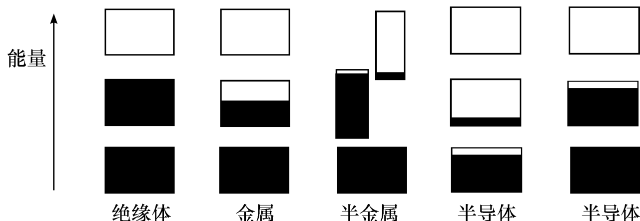
如果在 z 方向加上强磁场后，该式变为

$$E_F = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\hbar eH}{mc}$$

也就是说,费米面由原来的连续的球面变为若干分立的圆周线。圆周线的大小和个数与磁场有关。这样,在磁场发生变化时,传导电子的能量出现间歇性的变化,使得磁化率出现随磁场的振荡部分。对于实际的金属,费米面不是完全的球面,而是具有特殊的形状,通过测量德哈斯–范阿尔芬效应,可以得出实际费米面的形状。

七、导电性质
Conductive Properties

固体的导电性质 conductivity of solids 每个固体都含有电子,固体的导电性质取决于电子对外加电场如何响应。从固体的能带理论可以得知,固体中的电子分布在各个能带上,这些能带之间隔着不存在电子轨道的能量区域,这种禁区称为能隙。如果所有的能带是完全充满的或是完全空的,则固体就是绝缘体,因为这时在电场中没有电子能够运动。如果有一个或更多的能带是部分被充满,则在电场作用下,处于最高的被部分充满的能带(费米能级)上的电子可以运动,固体的行为就是金属性的。如果除了一个或两个能带是几乎空的或几乎充满以外,其余的能带全部充满,则固体就是半导体或半金属。这些不同的导电情况可由下图表示:



金属 metals 见“固体的导电性质”。

半导体 semiconductors 见“固体的导电性质”。

绝缘体 insulators 见“固体的导电性质”。

半金属 semi_metals 见“固体的导电性质”。

漂移速度 drift velocity 金属和半导体中载流子在外电场作用下除热运动以外获得的附加定向运动的平均速度,称为漂移速度。漂移速度是外电场的加速和电子受到的散射共同作用的结果:外电场使电子加速,但散射使得电子不能无限制地加速而最终获得一个有限的平均速度。漂移速度比电子热运动的速度要小许多。漂移速度 v 与电场强度 E 成正比

$$v = \mu E$$

比例常数 μ 称为迁移率。迁移率与固体的温度、无序程度等都有关系。

迁移率 mobility 见“漂移速度”。

Cryophysics
低温物理学

一、低温物性概要
Synopsis of Physical Properties at Low Temperature

低温物理学 low temperature physics 是研究在低温下(包括极低温)物质物理性质的物理学的一门分支学科。低温物理学研究的对象主要是凝聚态物质,包括正常气体在低温下凝聚的液体和固体,还包括凝聚态物质与周围环境和媒质的作用,如气态环境,电磁场,压力,接触物质等的作用等。物质的低温物性,包括在低温下物质的力、热、电、磁、光等性质,以及相变,相平衡,相的稳定性,临界现象等。不少元素、合金和化合物在低温下呈现的超导电性现象,已形成了物理学的另一门分支学科——超导物理学。低温下电子学呈现的一些特性,例如电子器件在低温下的热噪声可甚小,从而甚好地提高其有效灵敏度等,特别是超导约瑟夫森(Josephson)器件呈现的多种特性,如直流和交流约瑟夫森效应等,已有广泛的应用,已发展为电子学和超导物理的另一个分支领域称超导电子学。

组成物质的分子、原子、电子等粒子间的相互作用是复杂的。在常温下,物质的宏观热力学性质一般由粒子无规热运动和相互作用的统计平均量来研究,而往往可掩盖着粒子本身和粒子间作用的量子性质。随着温度的降低,特别在极低温下,粒子热运动就相对微弱,量子性质呈现明显,所以此时宏观尺度呈现出的量子效应,即宏观量子效应也就明显,甚至呈现突变现象。超导和超流现象就是不同场合下宏观量子效应呈现的不同表现形式。又如在常温下的固体比热可忽略固体中电子比热的贡献,但在极低温下,晶格振动弱,费米面附近电子的比热成为对固体比热的主要贡献。凡此等等,低温物理学也可说是低温下的量子物理学。量子液体,如费米液体和玻色液体也是很好的例子,但也可以用唯象方法和理论来研究宏观量子效应,如关于超导电性的金兹堡-朗道(Ginzburg-Landau)唯象理论和关于超流的朗道猜测其元激发谱所描绘的唯象理论等。

低温物性所呈现的各种奇特现象对科技的发展起到很大的作用,已引起极大的关注。超流和超导电性的发现,BCS(Bardeen,Cooper,Schrieffer)理论,约瑟夫森效应,高温超导体的发现等均获得诺贝尔物理学奖。美籍华人崔琦等发现在极低温和强磁场中对压在一起的半导体晶片砷化镓和砷铝化镓中出现电子无阻量子流体和几分之一的电子电荷的奇特现象等,也为新理论的发展起到重要作用,他们对量子物理学研究所作的重大贡献获得1998年诺贝尔物理学奖。低温下的化学元素物质,也包括如液氮、液氧、液氢、液氦和它们的固态物质(液氦需加压后才可成为固氦),合金,化合物,半导体,绝缘体,电介质,磁性物质,液晶,复合材料,塑料等等的物性有着广泛的研究,并对工程技术,高能物理,航空航天,电子学,生物学,医学等等的研究和应用起到重要作用。低温物理学对物质世界的进深认识起到重要作用,并已成为物理学中很活跃的一个领域。

低温物性 physical properties at low temperature 见“低温物理学”。

量子液体 quantum liquid 低温下形成的^{4}He和^{3}He液体,在常压下,就是温度 $T\to 0$K也不能凝结成固体。它们的量子效应显著,与常规液体有很大不同。它们在各自对应的温度 T 和压力 p 下,各自发生由黏性液体转变为无黏滞的超流液体的相变,还存在其他的特殊现象。这些都是液体的量子效应所致,称这些液体为量子液体。对遵从的量子统计性质的粒子所组成的量子液体而言,又可区分为费米液体(如^{3}He液体)和玻色液体(如^{4}He液体)两类(参见“液氦Ⅰ和氦Ⅱ”和“液^{3}He的超流动

性”)。

费米液体 Fermi-liquid 遵从费米-狄拉克(Fermi-Dirac)统计的粒子构成的量子液体。例如^{3}He液体的^{3}He原子,它外层有2个电子,原子核中有2个质子和1个中子,共有奇数5个费米粒子构成,作为复合粒子的原子整体仍是费米子,遵从费米-狄拉克统计,故^{3}He量子液体是费米液体。按朗道(Landau)费米液体理论,费米液体是相互作用费米粒子的多粒子系统,不能单独讨论粒子本身,如对^{3}He液体,不能单独讨论^{3}He原子,而应讨论的是液体中的粒子加上与其相互作用的近邻粒子“云雾”一起组成的准粒子。对正常费米液体,在系统处于低激发态时,类同于理想费米气体,如金属中自由电子气体模型。用准粒子的有效质量近似,将系统可看做是费米型准粒子组成的理想气体,遵从费米-狄拉克统计规则和分布,其基态在动量空间中是准粒子占满的费米球,低激发态准粒子能量 $\varepsilon_P = \mu + p_F(p - p_F)/m^*$,这里 μ 和 p_F 分别是化学势和费米动量,p 和 m^* 分别是准粒子的动量和有效质量。这里只是在低激发态将准粒子看做自由粒子,更高激发态的准粒子能量,则需考虑准粒子间的相互作用情形。朗道研究了费米液体中的元激发,准粒子的相互作用,磁化率、零声、压缩系数和输运特性等,并为实验证实。

准粒子间和粒子间作用的集体效应在一定压力 p 和温度 T 下可能引发粒子间的配对作用而成为玻色子,从而发生相变,这已为液体^{3}He原子配对转变为超流液体,以及某些金属、合金和化合物中电子配对(库珀对)而转变为具有超导电性所证实。费米液体理论的发展,对研究核物质,中子星和金属等物质的费米粒子某些行为已起到重要作用,已成为量子液体物理的重要支柱。

玻色液体 Bose-liquid 遵从玻色-爱因斯坦(Bose-Einstein)统计的粒子构成的量子液体。例如液体^{4}He,其原子外层有2个电子,原子核中有2个质子和2个中子,共有偶数6个费米粒子构成。作为复合粒子的^{4}He原子是玻色子,遵从玻色-爱因斯坦统计,故^{4}He量子液体是玻色液体,其性质见“液氦Ⅰ和氦Ⅱ”。

在玻色量子液体中,波长比原子间距大的小动量 p 的元激发通常看做为流体动力学中的准粒子——声子的动量,其能量与 p 是线性关系:$\varepsilon = up$,这里 u 是液体中声速,与固体中声波有三个极化(一纵二横)不同,在小动量 p 的液体中只有纵向极化一种,并可将玻色液体看做是理想玻色气体,则固体中的振动声波的热力学公式除以3即可适用于上述情形。对动量较大的准粒子,则还必需考虑它们间的相互作用影响。对理想玻色气体,在凝聚温度 T_c 和 T_c 以下发生玻色-爱因斯坦凝聚,大量玻色粒子凝聚可处在 $\varepsilon=0$,即 $p=0$ 的基态(见“玻色-爱因斯坦凝聚”),虽尚有零点能,但仍不具有超流动性,还需考虑粒子间的相互作用。

零点能 zero-point energy 在量子力学中,当振动不大时的简谐振子形成本征振动时,其相应的本征态对应的能量是量子化的,$E_n = \left(\frac{1}{2}+n\right)h\nu$,这里 $n=0,1,2,\cdots$,是正整数,h 和 ν 分别是普朗克常数和频率,而基态 $n=0$ 对应的能量 $E_0 = h\nu/2$ 称零点能。例如对固体的晶格小振动而言,则声子态是晶格振动的本征态,基态对应的零点能就是 $h\nu/2$。一般地在温度 $T=0$K 时,虽然热运动能可认为消失,但实际上还存在有零点能。

从量子力学不确定关系来估计粒子(分子和原子等)的零点运动动能为

$$E_0 = (\Delta p)^2/2m \approx h^2/2mV_a^{2/3}$$

这里 a 为相邻两个粒子间的平均距离,Δp 为粒子动量的平均不确定范围,$V_a = a^3$,m 为粒子质量。对^{4}He单原子分子,在常压和 $T=4.215$K 以下时原子系统是液体,但原子间范德瓦尔斯(Van der Waals)吸引力弱,而零点能效应突出,以致在 $T=0$K 时仍不固化,被称为永久液体。实验推测,在 $T=0$K 时需加压 $p\approx 2.5$MPa 才可固化为固体。

电子比热 electronic specific heat 忽略金属中的公有电子间的库仑互作用和与晶格的势场作用等影响而理想化为自由电子,它们遵从费米统计,受泡利不相容原理限制,电子系统每个能级上至多只能容纳自旋相反的2个电子,对比热的贡献也限于在费米面附近为数不

太多的电子，所以不能用经典的能量均分定理来解释金属中的电子比热。理论结果表明，电子比热 C_V 与温度 T 成正比，在常温下远小于晶格振动对比热的贡献，故可忽略。但在足够低的温度下，晶格振动的比热按 T^3 迅速下降，电子比热就不能忽略，甚至作主要贡献，这与实验结果相符。

固体比热 specific heat of solid 经典模型假设晶格离子在其平衡位置附近相互独立地作简谐小振动，自由度的每一平方项按能量均分定律对比热贡献为 $k/2$，k 是玻耳兹曼常数。这模型一般地在常温和较高温度 T 下与杜隆、珀蒂(Dulong, Petit)实验定律的摩尔比热 $C_V=3R$ 相符，R 是摩尔气体常数。但在低温范围则 C_V 随 T 很快下降，且 $T\to 0$K 时 $C_V\to 0$，这与经典理论结果不符。其原因是固体系统中的复杂相互作用所呈现的量子现象在 T 比较高时被热运动现象所掩盖，而在低温时，热运动大为减弱，量子效应占了主导地位所致。1907 年爱因斯坦假设晶格有 N 个格点的 $3N$ 个振动自由度均以同一个圆频率 ω 作简谐振动，其能量是量子化的，$E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，$n$ 是正整数，ħ 是除以 2π 的普朗克常数。这个简单模型称爱因斯坦模型。由此用统计方法给出平均能量后得出的摩尔比热为：

$$C_V=3R\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{\theta_E/T}\Big/\left(e^{\theta_E/T}-1\right)^2$$

这里 $\theta_E=\hbar\omega/k$ 称爱因斯坦温度，对多数固体，θ_E 在 100K 至 300K 之间。当 $T\gg\theta_E$ 时，$C_V\simeq 3R$，与上述经典模型与实验结果相符。当 $T\ll\theta_E$ 时，$C_V\simeq 3R(\theta_E/T)^2 e^{-\theta_E/T}$，与实验定性相符，但 $T\to 0$K 时 $C_V\to 0$ 的过程中 C_V 下降过快，与实验结果偏离也大。1912 年德拜(Debye)改进了爱因斯坦模型，他将固体看做是一种连续的弹性媒质，媒质的每一简正振动模式是具有一定的频率、波长和传播方向的弹性波，每一频率的波有一个纵波和两个横波，频率有一高限，振动模式也是量子化的。这模型称德拜点阵振动模型，简称德拜模型。按此模型所得的理论结果从高温到低温区和实验结果均符合相当好。在高温时 $C_V=3R$，在低温时

$$C_V=3R\frac{4\pi^4}{5}\left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3。$$

这里 $\theta_D=\hbar\omega_{max}/k$ 称德拜温度，它与频率高限 ω_{max} 有关，视固体材料性质有所不同。对一般的元素材料，θ_D 约在 200K 至 400K。由上式知在低温下 C_V 随 T^3 而变化，称德拜 T^3 定律，简称 T^3 定律。对金属固体，一般在 3K 以上低温下 C_V 符合 T^3 定律，在 3K 以下则还需考虑电子比热对固体比热的贡献。对各向异性晶体和波长可与晶格常数相比拟时，德拜模型也失效。

爱因斯坦模型 Einstein model 见“固体比热”。

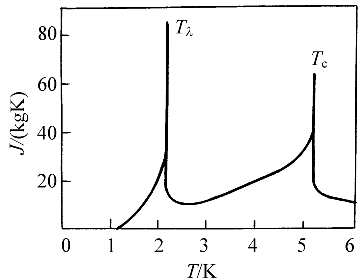
爱因斯坦温度 Einstein temperature 见“固体比热”。

德拜模型 Debye model 见“固体比热”。

德拜温度 Debye temperature 见“固体比热”。

T^3 定律 T^3 law 见“固体比热”。

λ 相变 λ-phase transition 实验测得低温下液体 ^{4}He 的比热 C_V 与温度 T 的曲线如下：



该曲线选择经过气液临界点相变 T_c 的等容线上。在 T_c(约 5K)附近出现一个尖峰。在 $T_\lambda=2.17$K 附近又出现一个尖峰。两尖峰间是正常液体 HeⅠ，$T<T_\lambda$ 时为超流液体 $\mathrm{H_e}$Ⅱ，T_λ 为正常液体和超流液体相变温度。这两个峰均呈希腊字母 λ(lambda)形状。为区别这两种不同物理现象，通常将 T_λ 处的相变称 λ 相变，它与临界点相变，铁磁相变，反铁磁相变等在相变点附近的比热跃变有相同特征，属二级相

变类型。

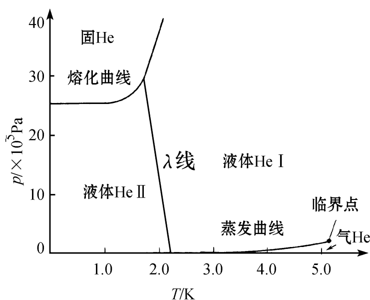
临界点相变 phase transition of critical point 气液相界线有一个终点称临界点 C，超过 C 点则液态和气态的差别不存在，在这里所发生的这种相变称临界点相变。由于在相变时热膨胀系数，压缩系数和比热均有突变，无潜热，故临界点相变属二级相变(见“λ相变”)。

玻色-爱因斯坦凝聚 Bose-Einstein condensation 遵从玻色统计的玻色粒子或玻色复合粒子的理想玻色气体系统设有 N 个这种粒子，在温度降低到所称的凝聚温度 T_0 以下时，由于粒子每个能级上占据的粒子数不限，可有 $N_0=N[1-(T/T_0)^{3/2}]$ 个玻色粒子凝聚在能量 $\varepsilon=0$，即动量 $p=0$ 的基态上，称玻色-爱因斯坦凝聚。这种凝聚是发生在动量空间。$T=0$K 时，则 $N_0=N$，系统所有玻色粒子均处在基态，其动量为零，对压强无贡献。在 $T=T_0$ 点上，比热是连续变化的，但它对 T 的微商有突变，猜测属三级相变。用玻色-爱因斯坦凝聚尚不能解释液 HeⅡ 的超流动性，必须考虑 ^{4}He 原子间的相互作用。

二、超流动性
Superfluidity

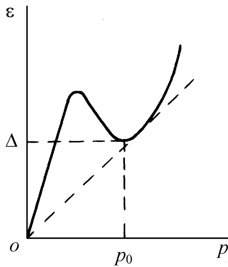
超流动性 superfluidity 正常流体在流动时由于分子间的内摩擦而呈现有流阻，影响其流速而减慢，可用流体的黏性系数来表征。例如窄通道两端压力差为 Δp，通道半径为 r，长为 l，在层流情况下，体积流速 $V=\pi r^4\Delta p/8\eta l$，这里 η 为黏性系数。实验发现当温度低于 2.17K 的液HeⅡ，在孔径小于 10^{-7}m 的毛细管中它照常流动，测出的 $\eta<10^{-12}$Pa·s，且流速与 Δp 和 l 无关。这种可认为 $\eta=0$ 的流体称超流体，这种无阻流动的超常性质称超流动性，它们是一种低温下的宏观量子效应。^{4}He 的同位素液体 ^{3}He 也具有超流动性(见“液 ^{3}He 的超流动性”)，但它们两者的物理起因是不同的。广义的超流动性也包括电流无阻流动的超导电性，其起因也不相同，但均是宏观量子现象的不同形式的呈现。

液氦Ⅰ和氦Ⅱ liquid HeⅠ and HeⅡ 在 1 大气压下，^{4}He 原子气体系统在温度为 4.215K 时开始液化，但因其零点能强，原子间的范德瓦尔斯(Van der Waals)吸引势能还不能使系统固化，到 $T=0$K 也仍然是液体(见相图)，可称之为永久液体，需加压至 25 大气压才开始固化。在 $T=2.17$K 处，液 ^{4}He 的比热，体膨胀系数等有突变，发生 λ-相变，相变后的液氦其黏性系数 $\eta<10^{-12}$Pa·s，比相变前的要小 10^{11} 倍，呈现无黏滞的超流动性，而 λ-相变前的液 ^{4}He 与正常液体属性一样。为区别这二种有差异的同原子 ^{4}He 液体，将 λ-相变前的正常液体称液体 HeⅠ，相变后的超流液体称液体 HeⅡ。超流现象是一种宏观量子现象，只要其流速不超过临界速度，仍保持具有超流动性(参见“临界速度”)。



朗道超流的唯象理论 phenomenological Landau theory of superfluidity 超流动性的液体 HeⅡ 是量子玻色液体，不能用经典理论来研究其特性。朗道在实验数据和量子玻色液体概念基础上于 1941 年提出了一个唯象理论。他设想在 0K 温度附近的波长比原子间距大的小动量 p 的准粒子(元激发)、即声子的能量 $\varepsilon=up$，u 是液体中声速，且只有纵波。随着温度 T 的增加，$\varepsilon=\varepsilon(p)$ 偏离线性关系，且依据比热测量数据，又设想 $\varepsilon(p)$ 到达一个极大值后又减小，在 $p=p_0$ 处到达极小值后又上升，形成一个如下图的元激发谱。系统处在热平衡时，准粒子处在 $\varepsilon(0)$ 和 $\varepsilon(p_0)$ 两个极小值附近区域内。前者准粒子即声子，后者准粒子称旋子，在 $p=p_0$ 附近旋子的能量为：

$$\varepsilon = \Delta + (p - p_0)^2/2m^*$$



$p = p_0$ 时形成对应的能隙 Δ,即激发一个旋子所需的最低能量。这里 m^* 是旋子的有效质量。在密度 $\rho = 0.145\text{g/cm}^3$ 时的经验参数值:$u = 2.4\times10^4\text{cm/sec}$,$\Delta = 8.7\text{K}$,$p_0/\hbar = 1.9\times10^8\text{cm}^{-1}$,$m^* = 0.16\,m_{\text{He}}$。这里 ħ 是除以 2π 的普朗克常数,$m_{\text{He}}$是^{4}He 的质量。朗道设想提出的液^{4}He 的元激发谱当时同行们并不太相信,直至 1957 年费因曼(Feynman)用量子力学原理给出了与朗道所提出的相符色散关系形式并为中子散射实验所证实后,均对朗道卓越的唯象推测表示敬佩。

朗道基于元激发用能量和动量变换给出的流体能量 E 为:

$$E = \varepsilon + \boldsymbol{p}\cdot v + \frac{Mv^2}{2}$$

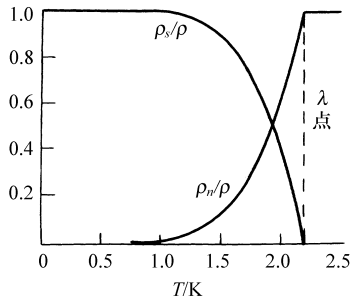
这里 M 为液体的质量,$Mv^2/2$ 是流动液体的初动能,$\varepsilon + \boldsymbol{p}\cdot v$ 是由于出现元激发而引起的能量变化(ε 和 $\boldsymbol{p}$ 分别是元激发的能量和动量),在运动中这项能量应减小,故是负的。由此给出 $v > (\varepsilon/p)_{\text{极小}}$,在这条件下可能出现新的元激发,而 $v_c = (\varepsilon/p)_{\text{极小}}$ 即在元激发谱 $\varepsilon(p)$上从坐标原点向曲线所作切线之切点纵横坐标值之比值为最小,亦即切线之正切或倾角最小,它近似为 $v_c = \Delta/p_0$。所以只要有能隙 Δ 存在,v_c 也可存在,而流速 v 不超过 v_c,则无新的元激发,液体流速也不会减慢,呈现无黏滞的超流动性,称 v_c 为临界速度,这就解释了 HeⅡ 液体的超流现象。

液^{4}He 的元激发谱 elementary excitation spectrum of liquid ^{4}He　见“朗道超流的唯象理论”。

旋子 rotons　参见“朗道超流的唯象理论”,它在费因曼所给波函数性质从量子力学在理论上是一涡旋环,且环可收缩到原子尺寸。存在多个旋子时,需考虑旋子间,旋子和声子间的相互作用。

临界速度 critical velocities　参见“朗道超流的唯象理论”,$v_c = \varepsilon/p \approx \Delta/p_0$。按此所得 v_c 约 60m/s。但实验上又测得约 10m/s 或更小,而通常乃至只有几个 mm/s 至几个 cm/s。这个矛盾认为是由出现涡旋乃至大量涡旋形成湍流态而引起的。考虑这个因素,费因曼计算了狭缝宽为 d 时的 $v_c \approx [\hbar/md]\ln(d/a_0)$,这里 m 为氦原子质量,$a_0 \approx 0.12\text{nm}$,ħ 为除以 2π 的普朗克常数,按此所得 v_c 约 10^{-1}m/s 量级。

HeⅡ 的二流体模型 two-fluid model of HeⅡ　在低于 λ 点相变温度 T_λ 附近,毛细管中测出液 HeⅡ 的黏性系数 η 比正常的 HeⅠ 液体的要小 10^{11}倍,但在旋转圆柱容器中测出的 η 值比正常 HeⅠ 的相差不大,这个矛盾由 Tisza 于 1938 年提出二流体模型和 1941 年朗道独立地从量子流体力学给出了更完善的二流体模型予以解释,并解释了其他实验现象。这个模型认为 HeⅡ 液体由密度为 ρ_s,而流速 v_s 是无旋的($\nabla\times v_s = 0$)、黏性系数 $\eta_s = 0$,且是零熵的超流部分(s),和具有正常液体性质的正常部分(n)这两个部分组成,而液体 HeⅡ 的总密度 $\rho = \rho_s + \rho_n$,ρ_s 和 ρ_n 随温度 T 的变化如下图:



实际上,正常和超流部分同是^{4}He 原子组成,正常流体用热激发产生的声子或旋子这两种准粒子来描绘(参见“朗道超流的唯象理论”),在 $0 < T < T_\lambda$ 间是正常和超流这两种不同性

质液体按不同比例的混合液体,两者之间没有摩擦。超流液体不需要压力差照常可在通道中流动。二流体模型解释了热机械效应等,还预言了在 HeⅡ 液体中存在第二声波,即熵波或称热波,并为实验所证实。

液 HeⅡ 的涡旋线 vortex lines of liquid HeⅡ 圆柱形容器盛以 HeⅡ 液体使其绕柱轴旋转,在转速超过临界速度 v_c 时,液 HeⅡ 就获得一定的角动量。费因曼设想此时液体内并不处处都满足 $\nabla\times v_s=0$,而存在某些穿出液面均匀阵列的奇异点(涡线),而奇异点的强度用环流表征:$K=\oint v\mathrm{d}\boldsymbol{l}$,相应的对称解 $v_s(\boldsymbol{r})=\theta K/2\pi r$,$\theta$ 为转动角 θ 方向单位矢量,r 为液体内取任一点的半径,由此设想给出的涡旋线密度 $n_0=2\omega_0/K$,ω_0 为角速度。他还设想液 HeⅡ 中的环流是量子化的,即 $mK=\oint \boldsymbol{p}\mathrm{d}\boldsymbol{l}=nh$,$K=nh/m$,$n$ 为正整数,h 和 m 分别是普朗克常数和氦原子质量,一个量子值 $K_0=h/m=0.997\times10^{-3}\mathrm{cm}^3/\mathrm{sec}$。这个预测已为实验所证实,故是量子液体,则旋转中的液 HeⅡ 仍然是超流的。理论给出单位长涡旋线的能量 E_v 近似为:

$$E_v\approx\frac{\rho_s K^2}{4\pi}\ln\frac{R}{\xi}$$

这里 R 为圆柱容器的半径,ξ 是涡旋核的半径,实验指出它是原子量级 $\xi\approx1\mathrm{A}^\circ$,$\rho_s$ 为超流液体密度。若 $R\approx1\mathrm{cm}$,则 $E_v\approx1.3\times10^5\mathrm{eV/cm}$。

环流量子化 quantization of circulation 参见“液 HeⅡ 的涡旋线”。

超流湍流态 superfluid turbulent states 液 HeⅡ 中流速超过临界值 v_c 时,有附加阻力存在,出现耗散流,非线性效应明显。例如有温度差时,在热流不大的线性范围,热流正比于温度梯度 ∇T,但流速超过 v_c 后,热流即减小,它正比于 $(\nabla T)^{1/3}$。这类耗散现象称超流湍流,所处的这种状态称超流湍流态,它可视为由大量涡旋线的存在而发生的。

费因曼超流理论 Feynman theory of superfluidity 基于量子力学求能谱的理论和液 HeⅡ 的特性,费因曼给出激发态的波函数,从而推算出与朗道(Landau)唯象理论所给的液 ^{4}He 的元激发谱。他将激发态的声子波函数写成

$$\psi_{ph}=\left[\sum_\tau \exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_i)\right]\varphi$$

这里 $\varphi=\varphi(\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2,\cdots,\boldsymbol{R}_N,)$ 是HeⅡ系统 N 个氦原子坐标 $\boldsymbol{R}_i(i=1,2,\cdots,N)$ 有关的基态波函数,但由于氦原子的流动性而不能重叠,原子靠得太近时的组态 φ 应等于零,互相分开的位形中 φ 应有极大值,但 φ 无波节。用上列波函数计算给出的能谱,在较低能声子谱段与实验符合,较高能段给出的能隙 Δ 比实验值高出约 2 倍。1956 年他和 Cohen 提出改进的波函数:

$$\psi=\left[\sum_\tau \exp(i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}_i)\right]\cdot\left[\exp i\sum_{i\neq j}S(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)\right]\varphi$$

并对 S-函数作近似:$S(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)=A\dfrac{\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}{R^3}$ 和 $e^{is}=1+is$,这里 A 是待定值。这样当波矢 $\boldsymbol{K}$ 小时可过渡到 ψ_{ph},而在旋子部分给出的能隙 Δ 则也与实验值较接近。他俩指出,朗道所称的旋子是代表一个涡环,环的半径可收缩到原子尺度。S-函数作近似后,$\psi=\psi_{ph}+\psi_s$,第一项即声子波函数,第二项为无旋的背景流动项。

零声 zero sound 液体 ^{3}He 中由于原子间的强相互作用,热激发的准粒子能量是准粒子分布的泛函。由朗道费米液体理论给出两个准粒子碰撞的时间 τ 与温度 T^2 成反比:$\tau\propto T^{-2}$。所以在足够低的温度下,τ 将比该液体中传播的任何声波的周期均要大,声波的传播将不可能,犹如真空中不能传播声音。但由于原子间的强相互作用,理论指出也可引起准粒子分布函数的变化,当变化频率 ω 满足 $\omega\tau\ll1$ 时,即相当于碰撞间行程远小于波长,则可建立起热力学平衡,此时声波的吸收小,与通常的流体力学声波一样,称第一声。但 $\omega\tau\gg1$ 时,振动中准粒子之间没有碰撞,在体元中也来不及建立热力学平衡。由于这种无碰撞波动在极低温,理论上可在绝对零度下发生,故称其为零声,并已为实验所证实。

第一声 first sound 参见“零声”,即通常的密度波。

第二声 second sound 在 HeⅡ 液体的二流体模型中,除了通常的密度波、即第一声波外,

朗道预言了还存在热波，或称温度波或熵波，即称之谓第二声，它是正常和超流两种液体总密度 $\rho=\rho_n+\rho_s$ 不变下的两种液体的相对流动所致，有关系式：$\rho_n v_n+\rho_s v_s=0$。这里 v_n 和 v_s 分别为正常和超流两种流体的速度，该式表示在总密度不变下，两种流体以相反方向流动。理论给出的第二声速 c_2 为：

$$c_2=\left(\frac{\rho_s T S^2}{\rho_n C_V}\right)^{\frac{1}{2}}$$

这里 T，c_V 和 S 分别为绝对温度，定容比热和熵波，由此用不同方法测出的 ρ_n 和其他方法直接测出的 ρ_n 均相符甚好。在毛细管中传播的第二声也有称第五声。

第三声 third sound　超流氦膜中传播的表面波称第三声。由于氦膜很薄，膜中正常成分有黏滞而被底板锁定，波在超流成分中传播时，超流成分受底板范德瓦尔斯力的作用，平行于底板运动作纵向振荡，不载熵，伴随有温度的振荡，而表面蒸发效应有缓和温差的作用，但伴随着表面既有蒸发，又有冷凝。这些因素在理论上给出的对饱和氦膜第三声波的传播速度为：

$$c_3^2=\frac{\rho_s}{\rho}fd\left[1+\frac{TS}{L}\right]$$

这里 $\rho=\rho_n+\rho_s$ 是两种成分液体密度之和，f 是范德瓦尔斯力，d 是膜厚，T 是绝对温度，S 和 L 分别为每克液氦的熵和蒸发潜热。TS/L 值在 $T=1\text{K}$ 时为 0.01，在 λ 点 T_λ 时为 0.15。对非饱和氦膜，$c_3^2=\bar{\rho}_S fd/\rho_{表}$，$\bar{\rho}_S$ 为超流氦的平均密度，$\rho_{表}$ 为膜表面密度。

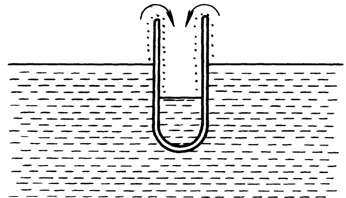
第四声 fourth sound　处在直径几十埃至几百埃通道多孔介质中的液氦，其正常成分有黏滞而被孔壁锁住，只有超流成分可在孔中运动。波在液氦中只在超流成分中传播，所以只有超流成分参与振荡，这种波传播称第四声，但没有自由表面存在，故密度和温度振荡均较第三声中为大。理论计算给出的第四声速为：

$$c_4^2=\left(\frac{C_1}{n}\right)^2\times\frac{\langle\rho_s\rangle}{\rho}$$

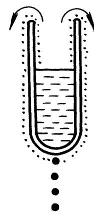
式中 $\langle\rho_s\rangle$ 为平均超流密度，ρ 是液氦密度，c_1 为第一声速，n 是多次散射修正因子，是因通道是弯弯曲曲引起的多次散射。一般地 n 不知道，故用第四声测得的 $\langle\rho_s\rangle$ 要用一个归一化因子。

第五声 fifth sound　毛细管中传播的第二声也有称第五声。

爬行膜效应 creeping film effect　这是液 He Ⅱ膜超流动性的一种表现。液 HeⅡ与容器表面接触的一层厚约 50～100 个原子厚度的膜称氦膜，它可以无阻地沿器壁流动（见下图），犹如沿器壁爬行，称爬行膜效应。当一端开口的空腔容器底部插入 HeⅡ池（图(a)），池中沿器壁氦膜上爬至顶端后沿内壁下爬，直至容器内外液面相平。相反，如图(b)，盛有HeⅡ液体容器放在池液面上方，容器中沿内壁上爬的氦膜经顶端又沿外壁下爬而注入液池，直至容器内HeⅡ流尽为止。氦膜的流速与压力差和膜长几乎无关。



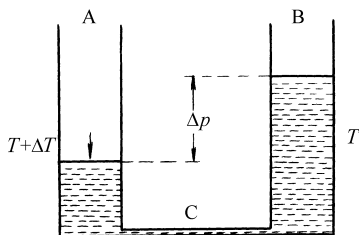
(a)



(b)

HeⅡ的机械热效应 mechanocaloric effect of HeⅡ　由二流体模型，液HeⅡ中由无熵的超流成分和温度 $T\neq 0\text{K}$ 时呈现有熵的正常成分两部分组成。下图装置中，A，B 是两个装有HeⅡ的

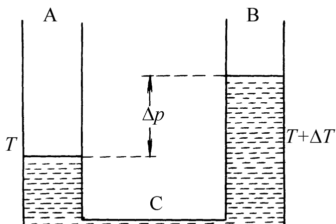
容器,底部用很细的毛细管 C 相连接。开始时 A 和 B 的液面高度一样且它们的温度也相同。然后在 A 上加压,不载熵的超流成分通过 C 流入 B,而正常成分有黏滞仍保留在 A 中,致使单位体积的熵在 A 中增大,而在 B 中减小,在绝热条件下,A 的温度将升高,B 的温度将下降,造成有温差 ΔT,这就是HeⅡ的机械热效应。



HeⅡ的热机械效应 thermomechanical effect of HeⅡ 下图表示了"HeⅡ机械热效应"的逆效应,称HeⅡ的热机械效应。图中表示在液HeⅡ容器 B 中加进一定热量,致使两边容器中 ρ_s 有浓度差,容器 A 中超流成分经 C 流进 B,又造成 Δp 的压差和在绝热平衡时的温差 ΔT,可用下式表示:

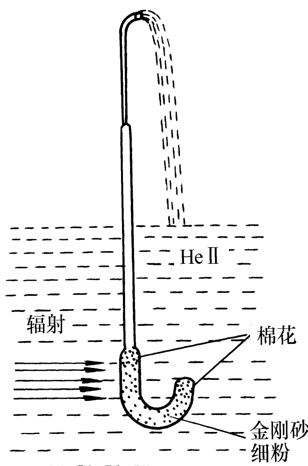
$$\frac{\Delta p}{\Delta T} = \rho S$$

ρ 和 S 分别是 HeⅡ的密度和单位质量的熵,乘积 ρS 是单位体积的熵。上式是 1939 年首先由伦敦给出,称伦敦定则。若 $\Delta T = 1\text{mK}$,则在 $T = 1.5\ K$ 时,$\Delta p = 2\text{cm}$ 液氦柱(压差),所以这个效应是大的。



伦敦定则 London rule 见"HeⅡ的热机械效应"。

喷泉效应 fountain effect 这是液HeⅡ的一种热机械效应。实验图示如下。放在液HeⅡ池中两端开口的 U 形管内填上金刚砂粉末,两边开口处用棉花塞上,但左边有一开口的毛细管,上部露出池面,这样的通道只有超流部分可通过。若 U 管下部一边加热,如用光辐照,则该处的超流浓度 ρ_s 要减小,造成与 U 管内另一边的超流成分的浓度差,超流成分形成向温度高的方向流动以填补浓度之差,被辐照一边的压力增大,超流液氦就从毛细管上端开口处喷出,可高达 30 厘米。这现象称喷泉效应。



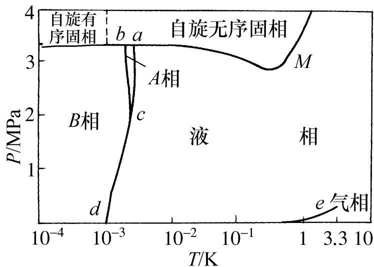
喷泉现象

^{3}He 的低温相图 phase diagram of ^{3}He at low temperature ^{3}He 是 ^{4}He 的同位素,其原子由 2 个电子,2 个质子和 1 个中子构成,属费米(Fermi)粒子,遵从费米统计。气液转变的临界点为:$T_e = 3.32\text{K}$, $P_e = 118\text{kPa}$,正常沸点 $T_B = 3.19\text{K}$,见如下页相图。液相是正常相,A 相和 B 相是两个超流相。由液相进入 A 相的转变是二级相变,A 相到 B 相的转变是一级相变。在相对低压下,由液相进入 B 相转变时也有比热跳跃,属二级相变。液^{3}He 中二级相变的比热跳跃均是有限跳跃。例如在饱和蒸气压下从液相转变到 B 相时,$\Delta C / C_{液} = 1.4$,在液相进入 A 相的转变线 ac 上对应 $p = 2.87\text{MPa}$ 时的 $\Delta C / C_{液} \approx 2$。

液^{3}He 在常压下温度到绝对零度仍保持液

态，是一种永久液体，此时需加压至 3.44MPa 才开始固化。固相^{3}He 又分自旋有序固相(呈现为反铁磁 bcc 固体)和自旋无序固相(呈现为顺磁 bcc 固体)。在熔化曲线上存在 M 点处的极小值，其位置在 $T_M=0.319\text{K}$，$p_M=2.931\text{MPa}$。温度低于 M 点的斜率 $\mathrm{d}p/\mathrm{d}T$ 是负的，它正比于两相的熵差，而^{3}He 固相的熵比液相的高，故在加压凝固时需吸收热量，致使环境温度下降。这种现象称坡密兰丘克(Pomeranchuk)效应，可用来致冷达到 1mK。

图中点 c 是 A 相、B 相和液相的多临界点。但在磁场中，c 点将不出现，使原来的 acd 和 bcd 两曲线之间形成一个狭区，且随温度的下降，下部狭区愈来愈小(图中未画出)，以致延伸到零压强时弥合，形成一个愈来愈狭窄的 A 相区，此时在液相和 A 相之间又出现夹有一个狭窄的超流 A_1 相。这样^{3}He 液体有 A_1，A 和 B 三个超流相。由于^{3}He 原子是费米子，形成的超流相必需原子配对为玻色粒子才可。理论和实验指出，A_1 相是核自旋与外磁场平行的原子配对(↑↑)，A 相还需增加有(↓↓)的原子配对，B 相则在 A 相原子配对上又增加有自旋相反的[(↑↓)+(↓↑)]配对。A_1 和 A 相是各向异性的，而 B 相几乎是各向同性的。



坡密兰丘克效应　Pomeranchuk effect　见“^{3}He 的低温相图”。

液^{3}He 的超流动性　superfluidity of liquid ^{3}He

^{3}He 原子是费米子，虽无电子磁性，但核自旋为 1/2，具有核磁性。液体^{3}He 有 A 和 B 两个超流相(参见“^{3}He 的低温相图”)，在磁场中又增加 A_1 超流相。超流动性与超导电性的成因不同，但也有类似性。超导的成因按 BCS 理论是费米面附近两个电子通过晶格振动交换虚声子的集体效应产生纯吸引作用形成束缚电子配对(库珀对)导致的，称超导电性的电–声子机制。配对后的库珀电子对是玻色子。^{3}He 液体超流动性的成因是：液体费米面附近的一个^{3}He 原子在某时刻 t 处于 $\boldsymbol{r}$ 位置，使其附近周围液体产生自旋极化，并将持续一段时间 τ 后才消失。若在小于 τ 时间之内另有一个^{3}He 原子运动到 $\boldsymbol{r}$ 附近受影响的区域，则它将被极化液体吸引或排斥(视该原子的自旋方向而定)，并起中介作用总可使平行自旋的该两个^{3}He 原子之间产生间接的吸引相互作用，反平行自旋的原子间产生间接的排斥作用。从能量对状态的稳定性言，则对三重态配对是有利的，从而导致 A 相和 B 相两个超流相的发生，在磁场中则又产生 A_1 超流相。所以形成^{3}He 原子的束缚对的集合态就形成超流动性态，简称超流态。这种配对机制称自旋极化机制。配对的原子对是玻色子，但它与超导体中电子配对的成因不同，电子配对中电子与晶格是两个区分的物质体系，而^{3}He 液体中配对对象和极化液体是同一物质体系，所以实际上^{3}He 原子配对也会影响液体本身，从而又起反馈作用影响配对自身，这称为自旋涨落反馈作用，它对超流相的稳定性起有重要作用，是对配对相互作用的修正。由于^{3}He 液体是强相互作用的费米(Fermi)液体，激发态用准粒子描述，故配对粒子也用准粒子配对描述，用有效质量代替原子质量。

三重态配对是两个准粒子形成束缚对的总自旋 $S=1$ 和角动量 $L=1$ 的态，包含有三个亚态：$|\uparrow\uparrow\rangle$，$|\downarrow\downarrow\rangle$ 和 $|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle$。为了在数学处理上较方便，Balian 和 Werthamer(简写 BW)引进矢量 $\boldsymbol{d}$ 后的三重配对态可写成：

$$\begin{aligned}\sqrt{2}\,|\Phi\rangle=&(d_x-id_y)|\uparrow\uparrow\rangle\\&+(d_x+id_y)|\downarrow\downarrow\rangle\\&+d_z[|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle]\end{aligned}$$

这里 d_x，d_y 和 d_z 是 $\boldsymbol{d}$ 的三个分量，在旋转情形下三个分量转变为一个矢量，且满足 $\boldsymbol{d}\cdot\boldsymbol{S}|\Phi\rangle=0$，$\boldsymbol{S}$ 为单位体积内净的核自旋角动量，且 $\boldsymbol{d}$ 是实数对应的态时其 $\boldsymbol{S}$ 的期望值为零。由 BW

给出的上列态称 BW 态，它对应于液^{3}He 超流相的 B 相。Anderson，Brinkman 和 Morel (ABM) 三人则对 $S_z=\pm1$，即对 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\downarrow\rangle$ 的线性组合情形来研究，即上式中的 d_z 分量为零的情形。这种情况对应的态称 ABM 态，其所处的超流相实验上对应于 A 相。实验上的 A_1 相是对应于仅含 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 配对的态，即 $\sqrt{2}|\Phi\rangle=2d_x|\uparrow\uparrow\rangle$。

液^{3}He 的自旋极化 spin polarization of liquid ^{3}He 见"液^{3}He 的超流动性"。

自旋涨落反馈 spin fluctuation feedback 见"液^{3}He 的超流动性"

自旋三重配对 spin triplet pairing 见"液^{3}He 的超流动性"。

BW 态 Balian-Werthamer states 见"液^{3}He 的超流动性"。

ABM 态 Anderson-Brinkman-Morel states 见"液^{3}He 的超流动性"。

朗道费米液体理论 Landau theory of Fermi-liquid 它是描写相互作用费米子多粒子体系的元激发(准粒子)行为和体系所相应物性研究的一种唯象理论。类似于固体中的元激发，朗道将正常费米液体中的粒子与其周围相互作用一同运动的近邻粒子，即"屏蔽云"一起组成准粒子，而将液体视作准粒子的集合体，并与无互作用自由费米气体系统能级相对应，缓慢加上粒子间的互作用，在假设每一个能级保持动量不变下对每个能级进行修正，直至全部相互作用引入后相应地给出准粒子系统的能级和费米面，此时准粒子的色散关系不同于理想费米气体系统的色散关系(能量和动量间的函数关系)，且准粒子的能量 ε 与准粒子的分布 n 有关，是一种泛函关系。在足够低的温度 T 下，$kT\ll\mu_0$，可有 $\varepsilon\approx\mu_0$，k 和 μ_0 分别是玻尔兹曼常数和 $T=0$K 时的化学势，即费米能，此时能谱形式可写成：

$$\varepsilon=\mu_0+\frac{p_0}{m^*}(p-p_0)$$

p_0 和 m^* 分别是费米动量和准粒子有效质量。考虑到准粒子之间的相互作用，朗道引入修正函数和有关参量称朗道参量，可由实验来定。例如所给出的比热 c_V，磁化率 χ，声速 c 的理论结果为：

$$c_V=\frac{m^*}{m}c_N,$$

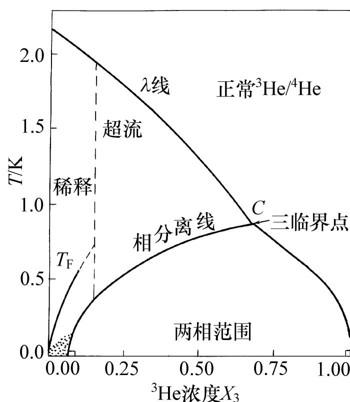
$$\frac{m^*}{m}=\left(1+\frac{1}{3}F_0\right),$$

$$\chi=\frac{m^*}{m}\left(1+\frac{1}{4}G_0\right)^{-1}\chi_N,$$

$$c^2=\frac{p_0^2}{3m^2}\,\frac{1+F_0}{1+F_1/3}$$

实验测出 c_V、χ、c 后即可推算出朗道参量 F_0，F_1 和 G_0 等以及比值 m^*/m。式中 c_N 和 χ_N 分别是理想费米气体为同密度时的比热和磁化率。朗道还研究了费米液体的输运性质，给出的黏性系数 η，热传导系数 K 和自扩散系数 D 等与温度的关系均与实验结果相符。朗道还指出温度愈低时，准粒子之间碰撞的平均自由程愈长，乃至温度低到足以使准粒子之间不发生碰撞时，依靠准粒子分子场作用来传播疏密波，即称之谓零声，并已为实验所证实(参见"零声")。

^{3}He-^{4}He 混合液 liquid mixture of ^{3}He-^{4}He ^{3}He 和^{4}He 可相互溶解。当^{3}He 原子溶入超流^{4}He 液中，随着^{3}He 浓度的增加，液^{4}He 的 λ-转变温度 T_λ 也随之降低(见图中 λ 线)，图中^{3}He



^{3}He-^{4}He 混合液相图

浓度定义为：$X_3=n_3/(n_3+n_4)$，n_3和 n_4 分别为^{3}He 和^{4}He 原子的数目，$X_3=0$ 时，$T=2.17$K 处液^{4}He 发生 λ-相变，开始转入超流相。温度降至 0.87K，对应的 $X_3=0.67$ 时，即图中三临界点 C，^{3}He-^{4}He 混合液发生相分离，

按其浓度高低和在不同温度下形成相分离线，且由于^{3}He原子比^{4}He原子轻，故^{3}He浓度高在上层的相，称浓^{3}He相，浓度低在下层的，称稀^{3}He相(对应^{4}He浓度较高的相)，上下两层也有分别称富^{3}He相和富^{4}He相。实际上，就是在 $T=0$K时，富^{4}He相中的^{3}He浓度也不为零，而是 $X_3=0.064$，而在 $T=0.1$K时，$X_3=0.07$，变化还是不大。若使^{3}He原子从浓相经过相界面进入稀相，类似于气体蒸发需吸收热量，致使温度降低，这就是制造稀释致冷机的原理，温度可降低到1mK。

由于液^{3}He的比热和熵比液^{4}He的要大得多，温度愈低，液^{4}He的热运动相对而言也显得愈小，在 $T<0.5$K，可认为其热运动停止，但^{3}He原子的运动必需排开^{4}He原子，其惯性质量增大，需用有效质量 m_3^* 代换^{3}He原子的真实质量 m_3($m_3^*\approx 2.4\,m_3$)。在足够稀的溶液中，质量为 m_3^* 的^{3}He原子行为忽略它们间的相互作用可用理想费米气体来描述，即图中虚线左边的稀释区，这里的 $X_3\leqslant 0.15$，简并温度 T_F 与 X_3 的关系由图中曲线表示，曲线上方可用经典气体描述，曲线下方用简并费米气体描述，左下方的小黑点范围与完全简并费米气体行为类同。理论给出的 $T_F(X_3)=(2.58)X_3^{2/3}$K。用 $X_3=0.01$代入，则 $T_F=0.12$K。

^{4}He在^{3}He液体中的稀溶液物性研究和^{3}He在超流^{4}He溶液中的原子配对等研究也引起注意，但后者因目前可能达到的极低温条件的限制在实验上尚未发现。

^{3}He-^{4}He溶液的相分离 phase separation of ^{3}He-^{4}He solution 见“^{3}He-^{4}He混合液”。

^{3}He-^{4}He混合液的λ线 lambda line of ^{3}He-^{4}He mixture 见“^{3}He-^{4}He混合液”。

三、超导电性

Superconductivity

超导电性 superconductivity 许多金属、合金和化合物各自在适当的温度和压力条件下，它们所具有的电阻就消失至微不足道，称零电阻现象，或处于零电阻状态。在此状态呈现无阻直流电流的物体不产生焦耳热损耗，具有完全导电性，或称超导，而物体称其为理想导体。完全导电性是超导电性最基本特性之一。对大块样品，若在外加不大的稳恒磁场下，样品既处于零电阻状态，又将磁场排斥到体外，即具有完全抗磁性，则可称这种物体为超导体，而完全抗磁性也是超导电性最基本特性之一。一般所称的超导电性或超导体均应具有这两种最基本的特性。现时简称的超导也应这样来理解。物体处于具有超导电性的状态称为超导态，也将零电阻态称为超导态是因为实际上也具有超导电性的其他基本性质。最先观察到零电阻态的是荷兰物理学家卡麦林-翁纳斯(Kamerlingh-Onnes)于1911年在约4.2K温度时发现汞的零电阻现象，由于他这一重大发现而获得诺贝尔物理学奖。到目前为止，在常压下已发现有20余种元素及大量合金和化合物具有超导电性。

完全导电性 perfect conductivity 见“超导电性”。

理想导体 ideal conductor 见“超导电性”。但理想导体与超导体尚有区别(参见“迈斯纳效应”)。

超导态 superconducting state 见“超导电性”。

超导体 superconductor 见“超导电性”。

零电阻 zero resistance 见“超导电性”。在临界温度 T_c 下一个很狭的温度范围内电阻很快消失的零电阻现象，在超导环中的持久电流实验中得到证实(参见“持久电流”)。例如用超导重力仪观察推算得到此时的电阻率 $\rho<10^{-25}\Omega\cdot$cm，用核磁共振方法测超导环中电流产生磁场的任何细微衰减的特征衰减时间下限为10^5年，实际上还可推算到$10^{10^{10}}$年时间内，而相应的电阻率就完全可用零来代替，称其为零电阻。

超导元素 superconducting element 在一定压强和温度下，具有超导电性的化学元素称超导元素，例如元素锡(Sn)在常压(1大气压)时在温度 $T\leqslant 3.72$K时呈现超导电性。见“周期表中元素的超导参量”。

周期表中元素的超导参量

H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al 1.140 105	Si*	P*	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti 0.39 100	V 5.38 1420	Cr*	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 0.875 53	Ga 1.091 51	Ge*	As*	Se*	Br	Kr
Rb	Sr	Y*	Zr 0.546 47	Nb 9.50 1980	Mo 0.92 95	Tc 7.77 1410	Ru 0.51 70	Rh	Pd	Ag	Cd 0.56 30	In 3.4035 293	Sn 3.722 309	Sd*	Te*	I	Xe
Cs*	Ba*	La 6.00 1100	Hf 0.12	Ta 4.483 830	W 0.012 1.07	Re 1.4 198	Os 0.655 65	Ir 0.14 19	Pt	Au	Hg 4.153 412	Tl 2.39 171	Pb 7.193 803	Bi*	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															

Ce*	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu 0.1
Th 1.368 1.62	Pa 1.4	U*	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

注：中有数字者为超导元素。第一行数字为转变温度 T_c(K)，第二行为绝对零度时的临界磁场(高斯)。有星号的元素只在薄膜状态或在高压下才具有超导电性。

超导合金 superconducting alloy 在一定压强和温度条件下，呈现超导电性的合金材料称超导合金。例如在常压下，$T \leqslant 9.2$K 时的合金 Nb-5Ti 呈现超导电性。参见“超导合金一览表”(表中 H_{c2}为第二临界磁场)。

超导合金一览表

合　　金	T_c/K	H_{c2}/kOe
Mo-33Re	10.8	≈28
Mo-50Re	12.6	27
Mo-50Tc	12.6	≈75
Mo-70Tc	12.0	
Mo-88.3U	2.06	≈25
Nb-15Hf	9.85	
Nb-25Hf	9.4	

续表

合　　金	T_c/K	H_{c2}/kOe
Nb-0-50Hf	8.3～9.5	
Nb-42-58Mo	0.25～9.2	
Nb-30Ta	6.9	9.5
Nb-Ta	—	350
Nb-15Sc	>4.2	
Nb-5Ti	9.2	16.5
Nb-10Ti	9.2	36
Nb-25Ti	9.8	73
Nb-28Ti	9.7	
Nb-33Ti	9.3	≈110
Nb-35Ti	10.02	
Nb-43Ti	—	>90

续表

合　　金	T_c/K	H_{c2}/kOe
Nb-50Ti	9.5	
Nb-60Ti	9.3	120(4.2K)
Nb-65Ti	8.0	
Nb-80Ti	6.6	
Nb-60Ti-4Ta	9.9	124(4.2K)
Nb-70Ti-5Ta	9.8	128
Nb-60Ti-5Zr		>90
Nb-12Zr	10.8	
Nb-25Zr	11	91
Nb-33Zr		>83
Nb-38Zr	10.5	
Nb-50Zr		>86
Nb-75Zr	10.8	>87
Nb-25Zr-2Ta		>70
Nb-25Zr-5Ta		>90
Nb-25Zr-10Ta		>70
Nb-77.8U	1.95	>25
Pb-35Bi	8.7	≈26
Pb-50Bi	8.4	≈30
Pb-15Hg	≈6.75	>13
Pb-In	3.39～7.26	
Pb-8In(质量比)		3.75
Pb-8.6Na		6.0
Pb-12.9Sn		1.1
Pb-40Tl	≈5.8	6
Re-74W		>30
Sn-2-8Sb	2.64～3.89	0.304～0.345
Ta-35Hf	6.7	
Ti-9Mo	3.2	
Ti-16Mo	3.7	
Ti-0～65Ta	4.4～7.8	14.0～138
Ti-20Ta	>4.2	
Ti-25Ta	>4.2	
Ti-29Ta	>4.2	
Ti-53Ta	8.1	88(4.2K)
Ti-60Ta	>4.2	
Ti-70Ta	>4.2	
Ti-75Ta	>4.2	
Ti-90Ta		>16
Ti-70～100Ta	4.3～6.5	42～108
Ti-29V	6.2	
Ti-50V	7.3	≈120
Ti-70V	7.6	
Ti-50～100V	5.3～6.7	10.5～1.25

续表

合　　金	T_c/K	H_{c2}/kOe
V-0～5-5Cr	2.0～5.3	0.7～1.25
V-1Cr	4.8	0.98
V-50Ta	7.4	1.2
Zr-10Au	2.79	
Zr-16Mo	>4.2	
Zr-70Mo	0.016	
Zr-0～15Rh	9.8～12.2	

超导化合物 superconducting compound 在一定压强和温度条件下,呈现超导电性的化合物称超导化合物。例如化合物 Nb_3Sn 在常压和温度 $T \leqslant 18.05K$ 时呈现超导电性。见"某些超导化合物一览表"。

某些超导化合物一览表

化合物	T_c/K	点阵常数 a/Å	电子浓度 电子/原子
Ti_3Sn	5.80	5.217	4.25
Ti_3Ir	5.40	5.009	5.25
Ti_3Pt	0.58	5.032	5.5
Ti_3Au	<1.2	5.096	3.25
Ti_3Hg	<1.2	5.188	3.5
Zr_3Au	0.92	5.482	5.75(11)* 或 3.25(1)
Zr_3Pb	0.76	—	4.0
Zr_4Sn	<1.2	5.65	4.0
Zr_3Sb	<1.2	5.634	4.25
Zr_3Hg	<1.2	5.558	3.5
V_3Si	18	4.722～4.728	4.75
V_3Ga	16.8	4.816(4.83)	4.5
V_3In	13.9	5.28～5.56	4.5
V_3Sn	7.0;3.8	4.94～4.96	4.75
V_3Ge	6.1～6.3	4.7830	4.75
V_3Pt	2.83	4.814(4.808)	6.25
V_3Sb	0.80	4.941	5.0
V_3Au	0.74	4.883	6.5(11)* 或 4(1)
V_3Rh	0.98	4.784(4.767)	6.0
V_3As	<1.0	4.74(4.75)	5.0

续表

化合物	T_c/K	点阵常数 a/Å	电子浓度 电子/原子
V_3Co	<0.35	4.675	6.0
V_3Ir	<0.35	4.786(4.785)	6.0
V_3Cd	<4.2	4.92～4.95 (4.806)	4.25
V_3Tl	<4.2	5.21～5.25	4.5
V_3Bi	<4.2	4.72	5.0
V_3Ni	<4.2	4.70(4.710)	6.25
V_3Pb	<4.2	4.937	4.75
V_3Al(退火)	11.65	4.812	
V_3Pd	<4.2	4.816	6.25
Nb_3Sn	18.05	5.289	4.75
Nb_3Al(铸态)	17.5;18.0	5.187	4.5
Nb_3Al(退火)	18.8	5.186	4.5
Nb_3Ca(退火)	14.9;16	5.171	4.5
Nb_3Au	11.5	5.2027	6.5(11)*
Nb_3In	9.2	5.303	4.5
Nb_3Pt	9.20～10.9	5.153	6.25
$Nb_{3.3}Ge$(淬火)	17	—	—
Nb_3Rh	2.5～2.64	5.115	6.0
Nb_3Bi	2.25	5.320	5.0
Nb_3Ir	1.7	5.131	6.0
Nb_3Os	1.05	5.121	5.75
Nb_3Sb	1.02	5.262	5.0
Nb_3Pb	<1.2	5.270	4.75
Ta_3Au	13～16	5.222	4.0
Ta_3Sh	8.35	5.276～5.278	4.75
Ta_3Sb	<1.2	5.259～(5.260)	5.0
Cr_3Os	4.03	4.677	6.50
Cr_3Ru(铸态)	2.15	4.683	6.50
Cr_3Rh	0.06	—	—
Cr_3Ir	0.45	4.668	6.75
Cr_3Ca	<1.02	4.645	5.25
Cr_3Ce	<1.20	4.623	5.5
Cr_3Pt	<0.30	4.706	7.0
Cr_3Si	<1.20	4.645	5.5
Cr_3Rh	<1.20	4.656	6.75
α-Mo_2C	6～7.3	—	—
β-Mo_2C	5.1～7.2	—	—

续表

化合物	T_c/K	点阵常数 a/Å	电子浓度 电子/原子
η MoC_{1-x}	7.4～8.9	—	—
Mo_2Tc_3	13.4～15	4.934	5.4
Mo_3Ir	8.8;9.6	4.972	6.75
Mo_3·($Mo_{0.4}Pt_{0.6}$)	8.8	—	6.6
Mo_3Os	7.20	4.973	6.5
Mo_3Ge	1.43	4.933	5.5
Mo_3Si	1.30	4.893	5.5
Mo_3Ca	0.76	4.943	5.25
Mo_3Al	0.58	4.950	5.25
Mo_3Be	<1.20	4.89	5.0
W_2C	2.95～3.65	—	—
W_3Si	<1.20	4.910	5.5
Cr_3O	<1.02		6.0

* 假设金的原子价等于11。

临界温度 critical temperature 这里指的是超导临界温度 T_c，一般是在常压下的超导元素、合金和化合物在电阻消失时的温度，即在正常(超导)态转变为超导(正常)态所对应的温度，故也称转变温度。实际上，从正常态转变到超导态的电阻消失过程中是在一个相对狭小的温度间隔内实现的，称这个间隔为转变宽度 ΔT_c，它与材料属性有关，同时也与材料纯度，晶体缺陷和内部应力等有关。小的宽度 $\Delta T_c < 10^{-3}$K，大的 ΔT_c 可到1K或几K(对有些高温超导材料)。一般地对相对大的 ΔT_c 的材料，其 T_c 和 ΔT_c 定义是：当正常电阻随温度 T 减小将快速下降到零时的所对应的电阻 R_n 消失一半时相对应的温度为 T_c，并取对应于 R_n 消失10%到90%之间对应的温度间隔为 ΔT_c。

超导电流 superconducting current 一般简称为超电流，是指超导物质的电阻消失后在闭合回路中流动的无阻电流。

超电流 supercurrent 即超导电流。

迈斯纳效应 Meissner effect 大块样品超导

体放置在小于临界磁场(对第二类超导体小于第一临界场)的稳恒磁场 $\boldsymbol{H}$ 中,然后将温度下降到临界温度 $T_c(H)$以下,则超导体体内磁场被排斥到体外。这个现象最先为迈斯纳(Meissner)和奥森费尔德(Ochsenfeld)于1933年发现,称迈斯纳效应,处于这种效应的状态称迈斯纳态。这是因为在 $T_c(H)$和以下温度时样品转入到超导态,可产生仅存在于穿透深度范围的表面无电阻的逆磁电流所致。这种无阻逆磁电流称迈斯纳电流,它所产生的逆向磁场将体内磁场排斥到体外,因而体内磁感应强度 $\boldsymbol{B}=0$,超导体具有完全逆(抗)磁性。但对无阻的理想导体而言,由于降低温度到 $T_c(H)$以下是在不变的恒定磁场中进行,所以无感应电流产生,磁场仍保持穿透导体的状态,不体现出有迈斯纳效应。所以对超导态而言,电阻为零(导电率为无限大)虽然是超导电最显著的特征,但超导体真正本性却还体现在完全逆磁性的迈斯纳效应上(参见"超导电性")。若先降温到 $T<T_c$,然后再外加小于该温度所对应的临界场的恒定磁场到超导体上,则磁场同样不能进入到超导体内。所以超导体内 $\boldsymbol{B}=0$ 的迈斯纳态与其经历的过程无关。后者的可逆性称可逆迈斯纳效应。

转变宽度 transition width 见"临界温度"。

转变温度 transition temperature 见"临界温度"。

迈斯纳态 Meissner state 见"迈斯纳效应"。

迈斯纳电流 Meissner current 见"迈斯纳效应"。因这种电流只存在于超导体表面穿透深度范围,故有时又称其为表面电流。

表面电流 surface current 见"迈斯纳电流"。

正常态 normal state 这里一般地指在超导转变温度以上,物质的电阻尚未开始很快地消失之前所具有的物理性质的物质所处的状态称正常态。

正常(超导)—超导(正常)转变 transition from normal(superconducting)state to superconducting(normal)state 一般指在常压下改变温度到 T_c 时,物质的电阻从 $R>0(R=0)$的正常态(超导态)到 $R=0(R>0)$的超导态(正常态)的转变。无磁场时这种转变属二级相变。

压力效应 pressure effect 压力对超导性质的影响称压力效应,主要体现在对超导体的临界温度 T_c 和临界磁场的影响上。压力效应有二种:一是在加压下对超导体性质的影响,其二对一些非超导物质在加压下可呈现超导体性质。前者例如对超导元素 Nb 在常压下的 $T_c=9.2\mathrm{K}$,而在 $4.5\times10^9\mathrm{Pa}$ 压强下则 $T_c=9.7\mathrm{K}$;后者例如在常压下的非超导元素 Ge,但在 $1.15\times10^{10}\mathrm{Pa}$ 高压下成为超导物质,其 $T_c=5.35\mathrm{K}$,后者压力效应又称加压下的超导电性。实验结果显示,一般地对非过渡元素超导体加压后 T_c 可降低,对一些过渡族元素及其合金超导体加压后 T_c 可增高。

加压下的超导电性 superconductivity under pressure 见"压力效应"。

持久电流 persistent currents 处在迈斯纳态的超导电流可持久地不衰减。对多连通超导体,例如处在小于垂直于环平面临界磁场的外磁场中的超导环,当温度下降到 $T_c(H)$以下后将外磁场撤除,圆环上存在超导态的感应环电流,因电阻为零,无损耗,就持久地不衰减,称持久电流或永久电流(参见"零电阻")。同时,环电流产生的穿越环空间的磁通也持久地保持,称冻结磁通或俘获磁通,这种现象在空心超导圆柱体和其他多连通超导体均可发生。

永久电流 permanent currents 见"持久电流"。

冻结磁通 frozen magnetic flux 见"持久电流"。

俘获磁通 capture magnetic flux 见"持久电流"。

磁通量子化 flux quantization 处在超导态的多连通超导体(如超导环,超导空心圆柱体等)空腔的磁通或冻结磁通只能是磁通量子 $\phi_0=h/2e$的整数倍,即 $\phi=n\phi_0$, n 是整数, h, e 分别是普朗克常数和电子电荷量, $\phi_0=2.07\times10^{-15}$韦伯,这种性质称磁通量子化,是一种宏观量子现象。这不仅在理论上,也在实验上被证实。这也是超导体具有的基本性质之一。以上情况对第一类超导体发生在多连通超导体。对第二类多连通超导体在小于第一临界

场时与第一类多连通超导体情形一样。但对大块样品的单连通的第二类超导体处在混合态时的磁通线,其磁通量也是量子化的。

磁通量子 flux quantum 见“磁通量子化”。

宏观量子现象 macroscopic quantum phenomena 物质的微观量子力学描述的微观粒子运动性质可在宏观尺度上呈现的现象称宏观量子现象,或宏观量子效应,即宏观范围上的量子效应。例如量子力学描绘的超导现象和超导电性在宏观尺度上呈现的迈斯纳效应,磁通量子化和约瑟夫森隧道效应等都可称为宏观量子现象。又如液体 HeⅡ 和液体 ^{3}He 呈现的超流现象也是宏观量子现象。

宏观量子效应 macroscopic quantum effect 见“宏观量子现象”。

单连通和多(复)连通超导体 simply and multiply connected superconductors 单连通超导体一般指的是不包含有非超导绝缘物质或空腔贯通的整块同质超导体,若有非超导绝缘物质或空腔贯通的超导体则称为多(复)连通超导体。从几何学上讲,在超导体外表面所包围的体积内任取一曲线回路,这回路在超导物质内可收缩到零(或点),且所取的任意回路均可收缩到零而无例外,则称单连通超导体。若有例外,即不能收缩到零,则称多连通超导体。例如空心超导圆柱体,则在围绕柱空腔周围取一回路就不能收缩为零。多连通超导体可有磁通量子化现象(见“磁通量子化”)。

超导电性的二流体模型 two-fluid model of superconductivity 为了解释超导电性的某些热力学性质,1934 年高脱(Gortor)和卡西米(Gasimir)提出了一个唯象的二流体模型。他们假定晶体中自由电子由正常的和超流的两部分电子组成。正常电子受晶格散射呈现有电阻,超流电子认为不受晶格散射,无电阻效应。他们提出超导态的热力势密度形式是

$$G(X,T)=Xf_s(T)+(1-X)^{\frac{1}{2}}f_n(T)$$

这里参量 $X=n_s/N$ 为超流电子浓度 n_s 所占自由电子浓度 $N=n_s+n_n$ 的比例,且 n_s 和 n_n 随温度 T 变化。n_n 是正常电子浓度。当 $T=0\mathrm{K}$ 时 $X=1$;$T=T_c$ 时 $X=0$。在 $0<T<T_c$ 之间,则 $1>X>0$,T_c 是临界温度。f_s 与 f_n 分别是与 T 有关的超流(s)和正常(n)部分的待定函数。他们又取 $f_s(T)=\mu_0H_c^2(T)/2$ 和 $f_n(T)=-\gamma T^2/2$,$H_c(T)$ 和 γ 分别是临界磁场和电子比热系数,μ_0 是真空磁导率。这个模型给出的 $H_c(T)$ 公式和超导相的电子比热是正确的,且可定性描述纯金属和浓度高的合金超导体的热导率随温度变化的关系。但不能解释电磁波吸收等现象,且 $G(X,T)$ 形式也与微观理论结果不同,有较大的局限性。

比热跃变 specific heat discontinuity 在无外磁场时,在临界温度 T_c 处,超导体从正常态转变到超导态时比热(C_s-C_n)有有限的跃变,且没有潜热,称比热跃变。这种正常-超导转变属二级相变。BCS 理论给出的跃变值$[(C_s-C_n)/C_n]_{T_c}\approx1.43$,对各向同性超导体一般地符合是好的。

超导体相变潜热 latent heat of phase change of superconductors 在一定温度 T 和压强 p 下,单位质量物质或一摩尔物质从一相转变到另一相过程中所放出或吸收的热量称相变潜热,简称潜热。按热力学电磁理论,在磁场 H 中超导体从正常态转变到超导态的相变潜热为:

$$\Delta Q=\mu_0TH_c(T)\frac{\mathrm{d}H_c}{\mathrm{d}T}$$

这里 $H_c(T)$ 为热力学临界磁场,μ_0 是真空磁导率。由于 $\mathrm{d}H_c/\mathrm{d}T<0$,故此时要放出潜热,相反过程则吸收潜热,属一级相变。在零磁场($H=0$)时,正常-超导转变就没有潜热,比热有跃变,属二级相变。见“比热跃变”。

临界磁场 critical magnetic field 在外磁场 H 中将正常态第一类超导体冷却到临界温度 $T_c(H)$ 时,样品即开始转入超导态(见“迈斯纳效应”)。对可逆迈斯纳效应,意味着在 $T<T_c$ 温度下也对应着开始破坏超导电性的磁场 $H_c(T)$,称临界磁场,这里又称热力学临界磁场。它的经验公式可写为:

$$H_c(T)=H_c(0)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

这里 $H_c(0)$ 是 $T=0\mathrm{K}$ 时的临界磁场。这类相

变属一级相变。对第二类超导体，则尚有第一，第二和第三临界磁场(见相应词条)。

可逆迈斯纳效应 reversible Meissner effect 见“迈斯纳效应”和“临界磁场”。

凝聚能 condensation energy 对可逆迈斯纳效应所存在破坏超导电性的临界磁场 $H_c(T)$，从热力学观点看，其包含的磁能密度也对应着零场下正常态和超导态之间的自由能密度之差，称超导态的凝聚能，即

$$f_n(T)-f_s(T)=\frac{1}{2}\mu_0 H_c^2(T)$$

由上式所表示的 $H_c(T)$ 又称为热力学临界磁场，它对第一类超导体也就是临界磁场。对第二类超导体，则 $H_c(T)$ 只表示由上式关系定义的热力学临界磁场，它并不代表相变点，而由第一、第二和第三临界磁场来描绘(见相应词条)。

热力学临界磁场($\boldsymbol{H_c}$) thermodynamic critical magnetic field ($\boldsymbol{H_c}$) 见“凝聚能”。H_c 也可通过可逆磁化曲线 $M=M(H)$ 求出的面积值来表示：

$$\int_0^{H_c}\mu_0 M\mathrm{d}H=\frac{1}{2}\mu_0 H_c^2$$

这里 M 是磁化强度，μ_0 是真空磁导率。$H_c(T)$ 与温度近似遵照如下关系：

$$H_c(T)=H_c(0)\left[1-\left(\frac{T}{T_c}\right)^2\right]$$

在 GL 理论中

$$H_c(T)=\alpha(T)/(\mu_0\beta)^{\frac{1}{2}}$$

$\alpha(T)$ 和 β 是 GL 自由能密度的展式系数。在 BCS 理论中，

当 $T\to 0$ 时

$$H_c(T)=H_c(0)\left[1-(1.06)(T/T_c)^2\right],$$

当 $T\to T_c$ 时

$$H_c(T)=(1.74)H_c(0)(1-T/T_c),$$

而

$$H_c(0)=\left[4\pi N(0)\Delta^2(0)\right]^{\frac{1}{2}}$$

$H_c(0)$，$N(0)$ 和 $\Delta(0)$ 分别是 $T=0$K 时的热力学临界磁场强度，态密度和能隙。

临界电流 critical current 处于超导态的超导体通以直流电流增加到临界值时样品转入正常态，称临界电流 I_c。电流破坏超导是由于电流产生的磁场对应着临界磁场时发生的。对纯样品，I_c 与温度关系为：

$$I_c(T)=I_c(0)[1-(T/T_c)^2]$$

$I_c(0)$ 是 $T=0$K 时的临界电流。若有外加磁场，则 I_c 与外场大小及其方向有关。对第二类超导体，特别非理想的第二类超导体，则还与晶体缺陷，范性形变，应力和位错等均有关，且在其进入混合态后，对磁通线钉扎力愈强的，则 I_c 愈高，具有好的实用价值。

伦敦理论 London theory 伦敦理论是 1935 年 F.伦敦和 H.伦敦兄弟两人基于零电阻现象和迈斯纳效应两个超导电性实验事实结合电磁理论而建立起来的，可用二个理论方程来描绘，称伦敦方程。伦敦第一个方程是：

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{j}_s}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mu_0\lambda_L^2}\boldsymbol{E} \tag{1}$$

这里 $\boldsymbol{j}_s$ 和 $\boldsymbol{E}$ 分别是超导电流密度和电场强度，$\lambda_L^2=m/\mu_0 n_s e^2$，$\mu_0$ 是真空磁导率，e 和 m 分别是电子电荷和质量(但由 BCS 理论知，这里 m 和 e 应为库珀电子对的质量 m^* 和电荷 e^*，$m^*=2m$，$e^*=2e$)，n_s 是与温度 T 有关的超导电子(实为电子对)数密度，在临界温度 $T=T_c$ 时 $n_s(T_c)=0$。式(1)代表零电阻的完全导电性，这是因为 $\boldsymbol{E}=0$ 时，在通路中也可以有与时间 t 无关的稳定超导电流 $\boldsymbol{j}_s$ 存在，它与正常导体电流是由电场维持的不同，在这里电场是起到加速超导电子的作用。伦敦第二个方程是：

$$\nabla\times\boldsymbol{j}_s=-\frac{1}{\lambda_L^2}\boldsymbol{H} \tag{2}$$

这里 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{B}/\mu_0$ 是磁场强度，$\boldsymbol{B}$ 是磁感应强度。式(2)表示超导电流是由磁场来维持的，且具有逆磁性质，即是逆磁电流，所以它具有将磁场排斥到体外的迈斯纳效应，即体内 $\boldsymbol{H}$(或 $\boldsymbol{B}$)$=0$，这可从如下简单例子看出。对处在完全超导态的超导体，用麦克斯韦方程 $\nabla\times\boldsymbol{H}=\boldsymbol{j}_s$，并计及 $\nabla\cdot\boldsymbol{H}=0$，则式(2)成为

$$\nabla^2\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}/\lambda_L^2 \tag{3}$$

同样可求得

$$\nabla^2\boldsymbol{j}_s=\boldsymbol{j}_s/\lambda_L^2 \tag{4}$$

对稳恒磁场中的半无限大超导体($0 \leqslant X < \infty$),由式(3)可求得

$$H(X) = H(0) e^{-X/\lambda_L} \quad (5)$$

这表示磁场在超导体表面有厚度为 λ_L 的穿透,而在体内则 $H=0$。同样,超导电流也只存在于表面 λ_L 厚度内,由于此表面电流是逆磁的,它所产生的磁场在体内抵制外部透入的磁场而使体内 $H=0$,即它具有屏蔽磁场进入体内的作用,故又称屏蔽电流。对超导圆柱体,则屏蔽电流在圆柱表面为环电流。产生迈斯纳效应的原因就在于此。这里 λ_L 称磁场的伦敦穿透深度,简称伦敦穿透深度或穿透深度。由于对大样品超导体,这种穿透现象发生在表面 λ_L 厚度范围,这现象又称表面穿透效应。

伦敦方程 London equations 见“伦敦理论”。

表面穿透效应 surface penetrating effect 见“伦敦理论”。

屏蔽电流 shielding current 见“伦敦理论”。对多连通超导体,见“超导磁屏蔽”。

伦敦穿透深度 London penetration depth 在伦敦理论中,磁场穿透超导体表面的深度称伦敦穿透深度:

$$\lambda_L = \left(\frac{m^*}{\mu_0 n_s e^{*2}} \right)^{\frac{1}{2}}$$

λ_L 与温度 T 的经验公式是:

$$\lambda_L(T) = \lambda_L(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^4 \right]^{-\frac{1}{2}}$$

一般地 $\lambda_L(0) \approx 10^{-8}\, m$。当 T 到达临界温度 $T_c(H)$ 时,磁场穿透整个超导体,样品转入正常态。

伦敦规范 London gauge 伦敦第二方程可通过 $\nabla \times \boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$ 用矢势 $\boldsymbol{A}$ 表示:

$$\boldsymbol{j}_s = -\frac{n_s e^{*2}}{m^*} \boldsymbol{A} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \quad (1)$$

但上式不是规范不变的。对单连通超导体,伦敦选取特定的规范

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$$

$$\text{以及,在边界上 } \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \quad (2)$$

上式称伦敦规范,以使式(1)成为规范不变的。这里 $\boldsymbol{n}$ 是边界法向单位矢量。这个规范也保证了 $\nabla \cdot \boldsymbol{j}_s = 0$ 和在边界上 $\boldsymbol{j}_s \cdot \boldsymbol{n} = 0$。对多连通超导体,则式(1)应改写为:

$$\boldsymbol{j}_s = -\frac{n_s e^{*2}}{m^*} \left(\boldsymbol{A} - \frac{m^*}{n_s e^{*2}} \nabla \chi \right) \quad (3)$$

这里 χ 满足 $\nabla^2 \chi = 0$。对单连通超导体,χ 是常数;对多连通超导体,由于冻结磁通是量子化的,χ 可以是多值函数。

超导磁屏蔽 superconducting magnetic shield 处于超导态的厚壁多连通超导体,若原先空腔中无磁场存在,在外加小于临界磁场的磁场后,由于有产生逆磁的屏蔽环电流而磁场不能进入腔内,起到磁场屏蔽的作用,称超导磁屏蔽。例如对空心超导圆柱体,则磁场不能进入圆柱空腔,况且,即使圆柱壁厚 $d \leqslant \lambda_L$,只要内半径 $r \gg \lambda_L$,也可起到屏蔽磁场进入空腔的作用。这里 λ_L 是伦敦穿透深度。

超导电性的局域和非局域理论 localized and non-localized theories of superconductivity 伦敦第二个方程(见“伦敦规范”)表明,在伦敦理论中实际上假定了 $\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$ 是正比于同一位置 $\boldsymbol{r}$ 的矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$,而与其他位置的 $\boldsymbol{A}$ 无牵连;换言之,局域的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 可确定该局域的 $\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$,反之亦然,即理论具有局域性,所以伦敦理论是一种超导电性的局域理论。若 $\boldsymbol{r}$ 周围 $\boldsymbol{r}'$ 位置的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')$ 与 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 有牵连而影响 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ 的改变,则 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 就为非局域性质的。由于 $\nabla \times \boldsymbol{A} = \mu_0 \boldsymbol{H}$,所以也可以说磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 是非局域性的。为此,超导电性需由非局域性理论来描绘,称超导电性的非局域理论。皮帕德非局域理论就是典型的超导电性非局域唯象理论。

皮帕德非局域理论 Pippard mon-localized theory 从伦敦穿透深度 $\lambda_L = (m^*/\mu_0 n_s e^{*2})^{\frac{1}{2}}$ 与超导电子浓度 n_s 的关系中可看出,λ_L 值的增大意味着 n_s 值在减小,且按伦敦第二方程,磁场 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$(或矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$)对 $\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$ 是局域性的,所以在表面穿透层 λ_L 内,磁场愈强的地方 n_s 愈小。但实验测量结果的穿透深度 λ 总是比 λ_L 要大,甚至大好多倍,说明超导电子间有一个相干或关联范围在影响着 λ 的

增大，即某处磁场不仅影响该处超导电子，并且也不同程度地影响电子间相干长度 ξ 范围内有关联的超导电子对 $\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$ 的影响。另一方面，含杂质的超导体的实验表明，杂质成分的增加会影响穿透深度也增大。这又意味着电子平均自由程 l 的减小使穿透深度 λ 增大，当然也影响超导电子间的关联范围。皮帕德根据这些非局域效应建立起的非局域理论是与正常金属中反常趋肤效应作类比，给出了皮帕德非局域方程：

$$\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r}) = -\frac{3n_s e^{*2}}{4\pi\xi_0 m^*} \cdot \int \frac{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}'))e^{-R/\xi_P}}{R^4}\mathrm{d}V' \tag{1}$$

这里 ξ_0 是纯超导体的相干长度，由 BCS 理论给出为：$\xi_0 = \hbar v_F/\pi\Delta(0)$，$\hbar$ 为除以 2π 的普朗克常数，v_F 是费米速度，$\Delta(0)$ 是 $T=0\mathrm{K}$ 时的能隙，$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$，而皮帕德引入的有效相干长度 ξ_P 有关系式：

$$\xi_P^{-1} = \xi_0^{-1} + (dl)^{-1} \tag{2}$$

d 是随不同材料有异的常数，一般地接近于 1。式(1)在二种极限情形可给出皮帕德有效穿透深度 λ_P 为：(1) $\lambda_P \gg \xi_P$ 时 $\lambda_P = \lambda_L(\xi_0/\xi_P)^{\frac{1}{2}}$；(2) $\lambda_P \ll \xi_P$ 时 $\lambda_P = [\lambda_L^2\xi_0]^{\frac{1}{3}}$。极限情形(1)相应于 l 很小或 $l \ll \xi_0$，则在 ξ_P 范围内 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')$ 基本无变化，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}') \approx A(\boldsymbol{r})$，式(1)可化为形如伦敦第二方程：$\boldsymbol{j}_s = -\xi_P\boldsymbol{A}/\mu_0\xi_0\lambda_L^2$，称条件 $\lambda_P \gg \xi_P$ 为伦敦极限，且类同于金兹堡-朗道唯象理论中区分超导体类别一样属第二类超导体，在这里也称伦敦超导体。极限情形(2)相应于 l 很大或 $l \gg \xi_0$，此极限 $\lambda_P \ll \xi_P$ 称皮帕德极限，是相应于很纯的大样品超导体言属第一类超导体，在这里也称皮帕德超导体。此时 $\xi_P = \xi_0$，ξ_0 也称为皮帕德相干长度，也可看做库珀电子对的平均尺度。这极限下的 λ_P 也称皮帕德穿透深度。

非局域效应 non-localized effect 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德方程 Pippard equation 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德相干长度 Pippard coherence length 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德穿透深度 Pippard penetration depth 见“皮帕德非局域理论”。

伦敦超导体 London superconductors 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德超导体 Pippard superconductors 见“皮帕德非局域理论”。

有效相干长度 effective coherence length 见“皮帕德非局域理论”。

伦敦极限 London limit 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德极限 Pippard limit 见“皮帕德非局域理论”。

皮帕德核 Pippard kernel 非局域皮帕德方程可改写为

$$\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{\mu_0}\int K(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}V' \tag{1}$$

称 $K(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 为皮帕德核。作傅氏变换后伦敦规范给出 $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q})=0$，且式(1)的傅氏分量间关系为

$$\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{q}) = -\frac{1}{\mu_0}K(\boldsymbol{q})\boldsymbol{A}(\boldsymbol{q}) \tag{2}$$

对照伦敦方程，则 $K(\boldsymbol{q}) = K_L(0) = \lambda_L^{-2}(0)$，这对应于 $\xi_P q \ll 1$ 的 $q\to 0$ 的局域情形。对 $\xi_P q \gg 1$，则 $K(q) = 3\pi K(0)/4q\xi$。是明显的非局域效应情形。所以皮帕德核反应电磁响应非局域效应强弱的性质。

伦敦刚性 London rigidity 伦敦将适合于弱磁场下描述多体超流电子满足伦敦规范 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$ 时的微扰波函数 ψ 假定是不变的，称伦敦刚性，并由此可证明伦敦第二方程的成立。

有序参量 order parameter 简称序参量，是描述与物质性质有关的有序化程度和伴随的对称性质。在连续相变上的主要特征是在相变点序参量连续地从零(无序)变到非零值(有序)(或反过程)。在描述超导体的正常-超导相变上，标志着正常电子与超导电子的转化。1950 年金兹堡(Ginzburg)和朗道(Landau)用 ψ 为序参量来描述，且 $|\psi|^2 = n_s$ 为超导电子对浓度，$\psi=0$ 为正常态。这里 ψ 也称超导电子的

有效波函数,一般地为复函数。在稳态中,ψ与位置,温度和磁场强度有关。戈尔柯夫(Gor'kov)在微观理论中将 ψ 与能隙 Δ 联系为

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{7\zeta(3)\, n_s^*(0)}{8(\pi k T_c)^2}}\Delta(\boldsymbol{r})$$

这里黎曼 ζ 函数 $\zeta(3)=1.202$, k 为玻尔兹曼常数。

金兹堡-朗道(GL)唯象理论 phenomenological Ginzburg-Landau(GL)theory 基于朗道二级相变(也称连续相变)理论,1950 年金兹堡和朗道(GL)在低于临界温度 T_c 附近将描绘超导电性的自由能密度 F_s 在外磁场中按序参量 $|\psi|^2$ 展开至 $|\psi|^4$ 项,并计及梯度项 $\nabla\psi$ 后,对各向同性超导体有:

$$F_s = F_{n0} + \alpha|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla - e^*\boldsymbol{A})\psi|^2 + \frac{\mu_0}{2}H^2, \tag{1}$$

称 GL 自由能密度。式中 F_{n0}是无外磁场的正常相自由能密度,$\mu_0\boldsymbol{H}=\nabla\times\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{H}$ 为磁场强度,m^*和 e^*分别为超导电子有效质量和有效电荷(实为库珀电子对的质量和电荷),$\hbar$ 为除以 2π 的普朗克常数,α 和 β 是展开系数,随材料性质由实验来定。在 T_c 附近 $\alpha(T)=-\alpha_0(1-T/T_c)$,$\alpha_0$ 和 β 是大于零的常数,对总自由能求极小,可得 GL 方程

$$\frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla - e^*\boldsymbol{A})^2\psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0, \tag{2}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{j}_s = -\frac{i\hbar e^*}{2m^*}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*}|\psi|^2\boldsymbol{A}, \tag{3}$$

和与绝缘外界接触时的边界条件:

$$\boldsymbol{n}\cdot(-i\hbar\nabla - e^*\boldsymbol{A})\psi = 0, \quad \text{(在边界上)} \tag{4}$$

$\boldsymbol{n}$ 为边界法向单位矢量。由于 GL 方程是非线性的联立方程,包含着宏观量子非线性效应,且 ψ 一般是 $\boldsymbol{r}$, T 和 $\boldsymbol{H}$ 的函数,所以有广泛的应用,成为研究超导体各种宏观量子现象物理性质的有力工具,且推广到各向异性超导体上(见"各向异性 GL 方程"),其应用范围更加广泛。在空间中若 ψ 变化很缓慢,计及 $|\psi|^2=n_s$,则方程(3)过渡到伦敦第二方程:$\boldsymbol{j}_s=-e^{*2}\cdot n_s\boldsymbol{A}/m^*$,说明伦敦方程只是在弱磁场近似中才适用。

1959 年,戈尔柯夫(Gor'kov)基于 BCS 微观理论用格林函数方法推导出 GL 方程,并将 $\psi(\boldsymbol{r})$与能隙 $\Delta(\boldsymbol{r})$联系起来(见"有序参量"),使 $\psi(\boldsymbol{r})$又有了微观物理意义,并且唯象系数 α, β 也有了微观表达:

$$\alpha(T) = -\frac{6(\pi k T_c)^2 N(0)}{7\zeta(3)\, n_s^*(0)} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_c}\right), \tag{5}$$

$$\beta = \frac{6(\pi k T_c)^2 N(0)}{7\zeta(3)\, n_s^{*2}(0)} \tag{6}$$

1998 年,徐龙道等基于 BCS 理论给出了宽广适用温区的、用微观量和温度具体表达无穷项展式各系数的完整的各向异性(也包括各向同性)GL 方程(见"各向异性 GL 方程")。

金兹堡-朗道(GL)自由能密度 Ginzburg-Landau(GL) free energy density 见"金兹堡-朗道(GL)唯象理论"。

金兹堡-朗道(GL)方程 GL equations 见"金兹堡-朗道(GL)唯象理论"。

金兹堡-朗道(GL)穿透深度 GL penetration depth 在弱磁场下,GL 电流方程类似于伦敦第二方程,GL 穿透深度可表示为:

$$\lambda(T) = \left(\frac{m^*}{\mu_0 e^{*2}|\psi(T)|^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

此时若近似于零磁场下的序参量 $\psi=\psi_0$,则有 $|\psi_0|^2=-\alpha/\beta$。当 $T\to T_c$ 时,

$$\lambda(T) = \lambda(0)(1 - T/T_c)^{-\frac{1}{2}}。$$

金兹堡-朗道(GL)相干长度 GL coherence length 在 GL 方程中引入一长度量纲 $\xi(T)$:

$$\xi(T)=\hbar/\sqrt{2m^{*}|\alpha|},$$

则在无外磁场下求一维非线性 GL 方程的几何关系时，$\xi(T)$正好代表 ψ 空间变化的自然长度，即 ψ 的相干范围（可看做库珀电子对的尺度），称 $\xi(T)$为 GL 相干长度。在接近于 T_c 时，$\xi(T)=\xi(0)(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}}$，它与纯超导体的皮帕德相干长度 ξ_0 的关系为 $\xi(T)=(0.7)\xi_0(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}}$，对第二类超导体可表示为 $\xi(T)=\left[\phi_0/2\pi\mu_0 H_{c_2}(T)\right]^{\frac{1}{2}}$，这里 ϕ_0 和 H_{c_2} 为磁通量子和第二临界磁场。

金兹堡-朗道参量 K GL parameter K　金兹堡和朗道在他们的唯象理论中引入一个无量纲参量 K：

$$K=\frac{\lambda(T)}{\xi(T)}$$

称 GL 参量。也可写成 $K=m^{*}/\hbar e^{*}\cdot(2\beta/\mu_0)^{1/2}$。用临界磁场来表示则 $K=H_{c_2}/\sqrt{2}H_c$，这里 $H_{c_2}=2|\alpha|m^{*}/\mu_0\hbar e^{*}$称第二临界磁场，而 $H_c=\alpha/\sqrt{\mu_0\beta}$称热力学临界磁场。$K$ 的大小与不同材料超导体的属性和物理性质有关，$K<1/\sqrt{2}$的超导体称第一类超导体，$K>1/\sqrt{2}$的称第二类超导体，它们在磁场中的性质有很大区别。

界面能 interface energy　在外磁场中，当大样品超导体内出现正常相区和超导相区同时存在时就有一个两相间过渡层或称界面层存在，它具有一定的能量以使在磁场、温度一定时保持两相平衡。这个能量称为界面能或表面能。由过渡区自由能并用 GL 方程，可求得界面能 σ_{ns}为：

$$\sigma_{ns}\simeq\begin{cases}(1.89)\xi\mu_0 H_c^2/2, & K\ll 1;\\ 0, & K=1/\sqrt{2}=0.707;\\ -(1.104)\lambda\mu_0 H_c^2/2, & K\gg 1.\end{cases}$$

这里 K 是 GL 参量。由上式可知，$K=1/\sqrt{2}$是 σ_{ns}正、负值的转变值。由上式和 K 定义（见“GL 参量 K”）还可知：(1) $K<1/\sqrt{2}$时，$\sigma_{ns}>0$，$\lambda<\xi/\sqrt{2}$，则此时将可呈现有非局域效应，且有 $H_{c_2}<H_c$，在磁场减小时首先到达 H_c，样品将转入迈斯纳态或中间态，这是属于第一类超导体的情形，故 $K\ll 1$ 也称皮帕德极限。(2) $K>1/\sqrt{2}$时，$\sigma_{ns}<0$，$\lambda>\xi/\sqrt{2}$，此时磁场与超电流间可视为局域性质的，且有 $H_{c_2}>H_c$，在磁场减小时首先到达 H_{c_2}，样品将转入有涡旋结构的混合态，属第二类超导体，并称 $K\gg 1$ 为伦敦极限（参见“皮帕德非局域理论”）。

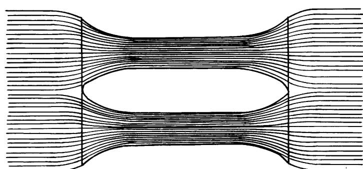
第一类超导体 type Ⅰ superconductor　GL 参量 $K<1/\sqrt{2}$的超导体称第一类超导体，也称软超导体，它具有正的界面能（参见“GL 参量 K”和“界面能”）。对处于外磁场 H 中的这类大样品超导体，其所处的状态与退磁因子 D（可由不同形状样品逆磁性质计算给出，D 可取从 0 到 1）有关。若退磁因子 $D=0$，则在 $H<H_c$ 时样品处于排斥磁场到体外的迈斯纳态。$H>H_c$ 则处于正常态。若 $D\neq 0$，则在 $(1-D)H_c<H<H_c$ 的范围，样品可处在有正常相和超导相两种相多个区域共存的中间态。$H>H_c$ 时处在正常态，$H<(1-D)H_c$ 时处在迈斯纳态。实际上在 $H_c<H<H_{c_3}$ 时，按样品形状和磁场方向的不同，样品可处在有表面超导相的态（见“表面超导电性”）。这里 H_{c_3}是第三临界磁场。对平行磁场中的长圆柱体和无限大平板 $D=0$，此时就不存在中间态。对球体 $D=1/3$，对横向磁场中的长圆柱体 $D=1/2$，在垂直磁场中的无限大平板 $D=1$，则它在 $0<H<H_c$ 区间均处于中间态。这类超导体在零磁场下的正常-超导相变属二级相变，存在磁场下的相变属一级相变。

超导体的退磁因子 demagnetization factors of superconductors　见“第一类超导体”。

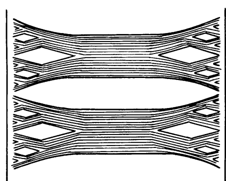
中间态 intermediate state　见“第一类超导体”。

朗道中间态结构模型 Landau models of intermediate state structures　第一类超导体在退磁因子 $D\neq 0$ 和磁场在中间态区域 $(1-D)H_c<H<H_c$ 时，大样品超导体可处于正常相区和超导相区共存的中间态。朗道于 1937 年在正界面能条件下首先提出了正常相层（N）和超导相层（S）交替共存的分层结构模型，也称非

分支模型,并为了适应 N-S 交界处 $H=H_c$,于1943年又提出了分支模型。图(a),(b)是对垂直于无限大平板磁场中的朗道中间态结构模型的示意图。磁场穿透处(N)用磁力线条描示,S 层区无磁场为空白。在中间态区域随着 H 的增大 N 层区也各自增大,而 S 层区则减小,到达 $H=H_c$ 时,整个样品开始转入正常态。

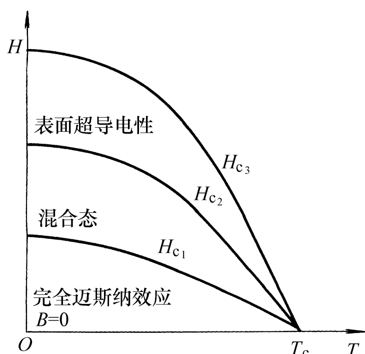


(a)非分支模型



(b)分支模型

第二类超导体 type Ⅱ superconductor GL参量 $K>1/\sqrt{2}$ 的超导体称第二类超导体,它具有负的界面能。对大样品,磁场 H 对其状态的磁结构变化有特别的影响,可用第一临界磁场 $H_{c_1}(T)$(也称下临界磁场),第二临界磁场 $H_{c_2}(T)$(也称上临界磁场)和第三临界磁场 $H_{c_3}(T)$(也称表面成核磁场)来划分,它们都是与温度 T 有关。(1) $H<H_{c_1}$ 时,磁通被排出体外,样品处于完全迈斯纳效应的超导相(态);(2) $H_{c_1}<H<H_{c_2}$ 时,磁通分区穿透样品,形成正常-超导两相混合相(态),磁通穿透区以一个磁通量子涡旋线为单元区,故也称涡旋态(相);(3) $H_{c_2}<H<H_{c_3}$ 时,对样品形状和磁场方向有关条件下还可具有表面超导电性,形成表面超导相(态);(4) $H>H_{c_2}$ 时,对无表面超导相的样品进入完全正常态,对有表面超导电性的样品则在 $H>H_{c_3}$ 时进入完全正常态。下图是纵向磁场中超导圆柱体的相图示意图。



第一临界磁场 first critical magnetic field 见"第二类超导体"和"阿布里科索夫理论"。

第二临界磁场 second critical magnetic field 见"第二类超导体"和"阿布里科索夫理论"。

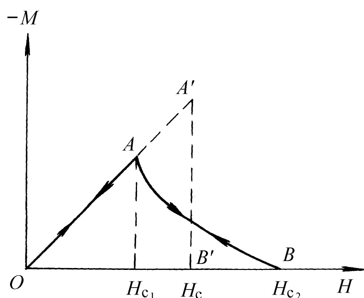
上临界磁场 upper critical magnetic field 即第二临界磁场。

下临界磁场 lower critical magnetic field 即第一临界磁场。

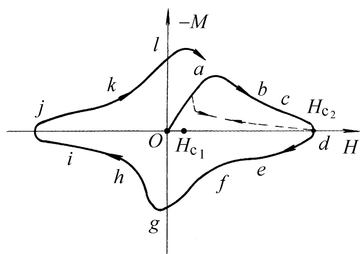
第三临界磁场 third critical magnetic field 见"第一、二类超导体"和"表面超导电性"。

成核场 nucleation field 见"表面超导电性"。

理想的第二类超导体 ideal type Ⅱ superconductors 磁化曲线是可逆的第二类超导体称理想的第二类超导体。如图,M 和 H 分别是磁化强度和外磁场强度,$H<H_{c_1}$ 时,样品处于完全迈斯纳态。$H_{c_1}<H<H_{c_2}$ 时处于正常-超导两相共存的混合态,此时涡旋线穿透样品,$-M$ 减小,直至 $H=H_{c_2}$ 时,磁场全部穿透,$-M$ 减小到零,样品开始转入完全正常态(或开始转入有表面超导相的态)。磁场从 H_{c_2} 减小时,按原磁化曲线的逆路径从 B 到 A 再回到原点 $O(H=0)$。这类超导体在 H_{c_1} 和 H_{c_2} 发生的相变属二级相变。图中 $OAA'B'$ 是退磁因子 $D=0$ 的第一类超导体的磁化曲线。若这两类超导体有相同的热力学临界磁场 H_c,则面积 OAB 和 $OA'B'$ 相等。



非理想的第二类超导体 non-ideal type Ⅱ superconductors　磁化曲线是不可逆的第二类超导体称非理想的第二类超导体，或称硬超导体，也有称第三类超导体。磁化曲线的不可逆性是由于这类材料的各种缺陷，杂质和其他不均匀性在一定程度上阻止磁通涡旋线的流动、进入和退出，起有钉扎作用造成的。加工后未退火样品的磁化曲线的不可逆性也是这样。在如下的磁化曲线图上，当 $0<H<H_{c_1}$ 时，与理想的第二类超导体曲线一样，处于完全迈斯纳态。在 $H_{c_1}<H<H_{c_2}$ 时，涡旋线进入样品后，对理想的第二类超导体，$-M$ 即减小（图中



虚线），直到 H_{c_2} 时 $-M=0$，样品进入完全正常态或有表面超导相的态。但对非理想的第二类超导体，由于钉扎作用，涡旋线进入较难，致使 $-M$ 继续增大，到 a 点涡旋线已进入相当数量后，继续增大磁场，$-M$ 才开始减小，曲线沿 b，c 下降，到 H_{c_2} 时进入完全正常态或有表面超导相的态。然后从 H_{c_2} 减小磁场，则与理想的第二类超导体沿虚线可逆返回不同，而是由于钉扎作用，涡旋线退出也有困难，致使 $-M$ 从零变为负的（倒向）。继续减小磁场到零，曲线沿 $d\rightarrow e\rightarrow f$ 到达 g 点，虽然这里 $H=0$，但 $M\neq 0$，表示还有不少涡旋线被钉扎而未退出样品，这称为剩余磁化强度，简称剩磁，类似于多连通超导体称俘获磁通，这里也称磁通捕获，而这种现象称磁滞现象，简称磁滞。再继续下去，则曲线沿 $g\rightarrow h\rightarrow i\rightarrow j\rightarrow k\rightarrow l$ 再到 a，形成一个与铁磁物质很类似的磁滞回线，称超导体的磁滞回线。这现象是由于不管涡旋线的进入或退出样品，钉扎都不同程度地起着阻止作用，称钉扎的不可逆性，从而形成有磁滞回线。由于涡旋线被钉扎的作用，只要工作电流还不致发生磁通的流动，就没有流阻，就可无阻地传输强电流，具有很好的应用价值。例如 Nb_3Sn 在 4.2K 温度和 10 万高斯的磁场中，电流密度还可承受 4.5×10^5 A/cm^2 以上。

硬超导体 hard superconductors　见“非理想的第二类超导体”。

第三类超导体 type Ⅲ superconductors　见“非理想的第二类超导体”。

软超导体 soft superconductors　见“第一类超导体”。

第二类超导体的剩磁性 residual magnetism of type Ⅱ superconductors　见“非理想的第二类超导体”。

磁滞 magnetic hysteresis　见“非理想的第二类超导体”。

第二类超导体的磁滞回线 magnetic hysteresis loop of type Ⅱ superconductors　见“非理想的第二类超导体”。

磁通捕获 flux trapping　见“非理想的第二类超导体”。

钉扎的不可逆性 pinning non-reversibility　见“非理想的第二类超导体”。

清洁和脏超导体 clean and dirty superconductors　1959 年 Anderson 首先提出用相干长度 ξ_0 和电子平均自由程 l 间相对极端的大小来定义清洁和脏的两类超导体：(1) $\xi_0\ll l$ 的超导体为清洁超导体，纯金属超导体一般属于这一类，故又称为纯超导体；(2) $\xi_0\gg l$ 的超导体称脏超导体，合金和含杂质的超导体一般属脏超导体。例如对纯铝虽属清洁超导体，其 $\xi_0\simeq$

$(1.6)\times10^{-6}$m,但只要含有0.1%的杂质就可满足脏超导体的条件。所以杂质浓度对区分这两类超导体影响是很大的。两类超导体的性质差异表现在相干长度 ξ 和穿透深度 λ 的表示式上有:

$$\xi_p(T)=(0.74)\xi_0(1-t)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\xi_d(T)=(0.85)(\xi_0 l)^{-\frac{1}{2}}(1-t)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_p(T)=(0.707)\lambda_L(0)(1-t)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_d(T)=(0.615)\lambda_L(0)\cdot(\xi_0/l)^{\frac{1}{2}}(1-t)^{-\frac{1}{2}}$$

式中下角号 p 和 d 分别表示对清洁和脏超导体,$\lambda_L(0)$ 为 $T=0$K 时的伦敦穿透深度,$t=T/T_c$,T_c 为临界温度。

纯超导体 pure superconductors 见“清洁和脏超导体”。

阿布里科索夫理论 Abrikosov theory 阿布里科索夫用迭代近似方法研究了非线性GL联立方程,1957年从理论上首先揭开了第二类超导体磁性质的非线性效应。他给出了从迈斯纳态开始进入混合态时的第一临界磁场 $H_{c_1}(T)$,即认为此时第一根涡旋线在样品中出现,其表达式为:

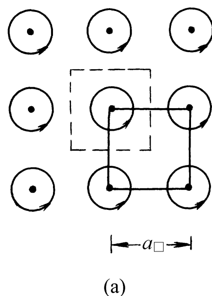
$$H_{c_1}(T)=\frac{H_c(T)}{\sqrt{2}K}(\ln K+0.081)=\frac{\phi_0}{4\pi\lambda^2(T)}\cdot\left[\ln\frac{\lambda(T)}{\xi(T)}+0.081\right]$$

同时他又给出了样品从混合态开始进入完全正常态(或有表面超导相的态)的第二临界磁场 $H_{c_2}(T)$:

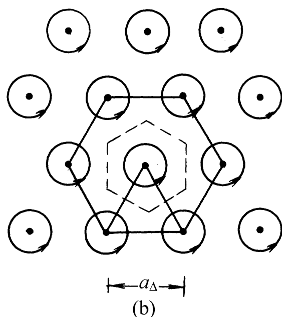
$$H_{c_2}(T)=\sqrt{2}KH_c(T)$$

这两个临界磁场均与温度 T 和材料性质的GL参量 K 有关。式中 $H_c(T)$ 是热力学临界磁场,$\lambda(T)$,$\xi(T)$ 和 ϕ_0 分别是穿透深度,相干长度和磁通量子。他还研究了混合态(也称涡旋态)中涡旋点阵(格子)分布结构和涡旋线结构等,并给出了明显形式,为拓宽和进深研究奠定了基础,并在应用上提供了理论依据。

混合态 mixed state 第二类超导体在 $H_{c_1}<H<H_{c_2}$ 时,在超导相背景上,平行于磁场方向的涡旋线垂直平面上形成点阵式地穿插着数量不等的、有磁通量子穿透的圆柱形涡旋线的正常相区域,在一定磁场下可形成稳定的超导和正常相两相混合的状态称混合态,或称涡旋态。由于界面能是负的,则正常区域分得越细,分界面越多,总界面能负的也越大,总自由能也就降低越多,状态就越稳定,这样存在一个最小磁通穿透。理论和实验均证实此最小磁通是一个磁通量子 ϕ_0,则在单位面积上磁感应量 $B=n\phi_0$,n 为整数。在靠近 H_{c_2} 密集的同向磁通线间由于存在相斥,稳定态就形成有规则周期性的涡旋线列阵结构,称涡旋点阵结构,或涡旋格子结构,而混合态结构或称涡旋态结构是包括上列结构和涡旋线结构两者在内的结构。阿布里科索夫理论给出点阵结构形式有四角形和三角形两种,而前者更稳定,但后来证实三角形点阵更稳定。示意图中(a)是正方形涡旋点阵,图(b)是三角形涡旋点阵,虚线所示是点阵元胞轮廓,前者为密集正方格子,后者为密集六角格子。绝大多数实验观察



(a)



(b)

到是(b)的形式,但也有少量是图(a)的形式。当外磁场愈接近 H_{c_2} 时,超导区中的磁场也愈接近外磁场,两者差别愈小,但点阵周期形式不变。到达 H_{c_2} 时两者磁场一样,整个样品转入正常态或有表面超导相的态。此类相变因序参量 ψ 是连续转变为零,属二级相变。

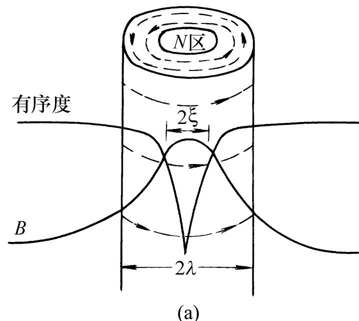
涡旋态 vortex state 即混合态的另一名称。

涡旋点阵(格子)结构 structure of the vortex lattice 见"混合态"。

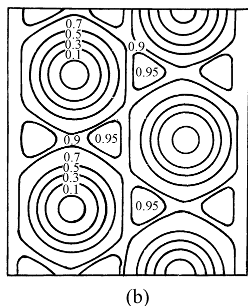
混合态结构 structure of the mixed state 见"混合态"。

涡旋态结构 structure of the vortex state 即混合态结构的另一名称。

涡旋线 vortex lines 在涡旋态中的涡旋线结构示意图见图(a),圆柱形中心部分半径约为相干长度 ξ,磁场从上向下穿透是正常(N)区域称磁通线,这里磁感应强度 B 最大。N 区周围是涡旋式的逆磁超导电流 j_s(虚线),致使 B 向外迅速减小,j_s 也随之减小,到离中心穿透深度 λ 距离时已减至很小,而序参量 $|\psi|^2$ 在 N 区中心为零,向外迅速上升。这样由磁通线和其周围回绕的涡旋超电流二部分构成的一条圆柱形区域称涡旋线,其总的磁通量为一个量子磁通 ϕ_0。在低于 H_{c_2} 附近对 GL 方程所计算的结果图形见图(b),它显示着三角形点阵格子形式,而点阵元胞为密集六角格子。图(b)中所列数字是约化的 $|\psi|^2$ 值($0\leqslant|\psi|^2\leqslant 1$)。



(a)



(b)

磁通线 magnetic flux line 见"涡旋线"。但也常有将磁通线即理解为涡旋线为同一名称。

涡旋线结构 structure of vortex line 见"涡旋线"。

钉扎中心 pinning centre 硬超导体中各种缺陷、杂质等能不同程度地制止磁通线的流动称钉扎,它们的位置称钉扎中心。钉扎中心分布不均匀,则涡旋线密度分布也不均匀。主要的钉扎中心如脱溶的异相颗粒,晶界,亚晶界,带状亚结构,位错胞结构等。

钉扎力 pinning force 硬超导体中的各种缺陷、杂质等对涡旋线起有钉扎作用的力称钉扎力,它的大小一般地用单位体积的最大钉扎力 F_p(简称钉扎力)表示,可不同程度地阻止磁通线的流动,以提高这类超导体的临界电流,起到更好的实用性。F_p 随温度升高而减小,与磁场也有关。

洛伦兹力 Lorentz force 处于混合态的第二类超导体,若磁通线密度分布不均匀,由于同向磁通线间有相斥作用而导致合力不为零,此合力称电磁力或洛伦兹力,它可推动磁通线的运动,是一种驱动力。设作用在单位体积磁通线格子上的洛伦兹力为 $\boldsymbol{F}_L$,它可表示为:

$$\boldsymbol{F}_L = \boldsymbol{J}\times\boldsymbol{B}$$

式中 $\boldsymbol{J}$ 是体电流,是由于存在磁通线密度梯度,相邻两层涡旋电流不能抵消而形成的。$\boldsymbol{B}$ 是磁通密度:$B=n\phi_0$,n 为磁通线密度,ϕ_0 是磁通量子。

磁通流动 flux flow 处在混合态的第二类超导体内若有传输电流,该电流也产生磁场,它与涡旋点阵中的磁通线发生作用,使磁通线密度分布不均匀,产生驱动磁通线由密处向疏处移动的洛伦兹力,造成磁通线的流动称磁通

流动。这种流动磁通线切割传导区就产生感应电动势或感生电场。这种在电势差上的电流,就意味着电能有损耗,以焦耳热形式释放出来,这类同于电流流经电阻的情况,称流阻或等效电阻 R_f,它小于超导体在正常态时的正常电阻 R_n。在温度接近 0K 时的流阻率 ρ_f 的经验公式为

$$\rho_f = \rho_n(H/H_{c_2})$$

这里 ρ_n 是正常态电阻率,H_{c_2} 是第二临界磁场。由此可见,ρ_f 与磁场 H 密切相关。另一方面,像流体运动受到黏滞阻力那样,磁通流动速度也不能无限地增大,也受到磁通黏滞力 $\boldsymbol{F}_v$ 的阻碍,它与磁通流动速度 v 有关:

$$\boldsymbol{F}_v = -\eta v$$

这里 η 也称黏性系数。

对理想的第二类超导体,由于不存在钉扎中心,所以在 H 超过 H_{c_1} 后流阻明显,临界电流低,实用价值差。对硬超导体,洛伦兹力超过钉扎力后才有磁通流动发生。钉扎力越强,临界电流越高,实用价值也就越好。

流阻 flow resistance 见“磁通流动”。

黏滞力 viscous force 见“磁通流动”。

临界态 critical state 在一定温度下,处在混合态的硬超导体,若磁感 $\boldsymbol{B}$ 和传输电流 $\boldsymbol{J}$ 的分布使样品内的洛伦兹力 $\boldsymbol{F}_L$ 和钉扎力 $\boldsymbol{F}_p$ 平衡,即 $\boldsymbol{F}_L = \boldsymbol{J}_c \times \boldsymbol{B} = -\boldsymbol{F}_p$,则称样品处于临界态,此时 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}_c$ 称临界电流密度。但若 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{J}$ 稍有变化,致使状态稍有偏离平衡态,发生弱的磁通流动,但最终涡旋线又重新分布而到达一个新的临界态而稳定下来。这样,在外磁场或 $\boldsymbol{J}$ 缓慢变化时,可认为样品经历一系列不相同的临界态。

磁通蠕动 flux creep 在有限温度下处于混合态的硬超导体,虽然还未到达临界态,但由于热激活能量促使了磁通线脱离原钉扎中心而跳跃到另一钉扎中心,由此引起磁通线的缓慢流动称磁通蠕动。安德森和基姆(Anderson-Kim)还假设磁通蠕动是成束的磁通线跳跃到邻近钉扎中心形成的一种运动。蠕动的速度与激活能和温度等因素有关,虽然速度缓慢,但若在电流产生的驱动力作用下横过载流导体蠕动时,将出现一个纵向电阻性电压,它与平均蠕动速度成正比。

磁热效应 magneto-thermal effect 与磁通蠕动有关的能量耗散以热的形式释放出来称硬超导体的磁热效应。磁热效应可导致体内局部升温,乃至整体升温。升温后导致钉扎效应降低,又导致进一步的磁通流动,又耗散能量以热的形式释放。如是若样品外流热量少于样品内因磁热效应产生的热量,造成样品热的不稳定性,体温再次升高。这样继续下去,可导致体温继续升高,乃至到达临界温度而失超(从超导态转入正常态),所以必须采取稳定性措施,如有效的增大向体外的热流以控制体温的升高,或选用钉扎力更强的材料和限制升温措施并用等。

热不稳定性 thermal instability 见“磁热效应”。

磁通跳跃 flux jumping 磁通运动导致有能量损耗,由于磁热效应,能量损耗又导致局部升温,局部升温导致该处钉扎效应降低,钉扎效应降低又导致磁通进一步运动。如是一次又一次的继续循环,可使原来少量缓慢的磁通运动引起大量的、迅速的磁通运动,即称磁通跳跃。这种现象若温度不加以采取措施控制,则体温升至 T_c 极限时,硬超导体即整体转入正常态。这就是硬超导体的不稳定问题。

磁通湮灭 flux annihilation 处于外磁场 H 中的硬超导体,当磁场逐渐从 H_{c_2} 减小到零时,由于钉扎作用,一部分正向涡旋线未退出样品,有磁滞现象。磁场由 $H=0$ 再反方向逐渐增大到 H_{c_1},反向涡旋线开始进入样品。相邻的正向和反向涡旋线间相互吸引,若两者或其中之一脱离钉扎吸引到一起就相互抵消,这二根磁通线消失,称磁通湮灭。这情况也出现在不同数量的正、反涡旋线间,在磁化曲线的 H_{c_1} 附近就有异常,已为实验所证实。磁通湮灭时磁能以热的形式释放出来,使样品局部升温而导致钉扎效应降低,进一步也会导致磁通蠕动。

比恩模型 Bean model 此模型是研究硬超导体包括临界态性质在内的电磁性质的简化

的简单模型。在临界态有：$\boldsymbol{F}_{\mathrm{L}}=-\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}=\boldsymbol{J}_{\mathrm{c}}\times\boldsymbol{B}$。比恩假设临界态的 J_{c} 是与 B 无关的常数，可写成 $F_{\mathrm{p}}=\alpha B$，这就是比恩模型的简单表式。结合电磁学公式如 $\mu_0\boldsymbol{J}=\nabla\times\boldsymbol{B}$，可对硬超导体电磁性质进行定性研究，如磁化过程，有传输电流情况和两者同时存在时的理论研究等。

钉扎机制 pinning mechanism 提出这种机制的有：(1)弹性能钉扎。在超导(S)-正常(N)相变中，压缩和弹性系数等有突变。涡旋线管中有 N 区，它与 S 区的弹性系数有差异，弹性能也不等，引起有弹性引力场。硬超导体内的缺陷等处也是引起弹性畸变之处，和磁通线发生相互作用。这些因素能引发产生钉扎作用；(2)镜像力钉扎。一个涡旋线接近 S-N 边界面时可受到界面吸引作用，这等价地看做界面对方如镜子后面有相反方向涡旋电流起吸引作用一样，称镜像力。所以涡旋线在界面附近受到钉扎作用称“镜像力”钉扎；(3)凝聚能钉扎。硬超导体基体背景和其中的一个个缺陷区域有差别，不同类型缺陷间也有差别，引起磁通线所在位置区的凝聚能也有差别，其差异一般用两处涡旋线临界磁场差异所显示的能量差 $\mu_0(H_{\mathrm{c}}^2-H_{\mathrm{c}}^{\prime 2})/2$ 来表示钉扎的凝聚能。由此可计算出钉扎力与磁感应 B 成正比。尚有其他机制提出，如高 K(GL 参量)机制。以上机制或二种机制并存等可定性或定量地与实验结果比较。

钉扎能量 pinning energy 在弹性能钉扎，镜像力钉扎，凝聚能钉扎等钉扎机制中所含的对钉扎效应起决定性作用的能量均称钉扎能量。

交流损耗 alternating current(A.C.)power loss 超导体通以交流电流或在交变磁场中，其传输电流有能量损耗并转变为热能，称交流损耗。此损耗与交变频率有关，乃至到达相当高频率时，超导体成为与正常导体一样。例如对锡，在频率高达红外区域时就与正常导体的锡几乎没有差异；但在低频下，则几乎无损耗。对处在混合态的硬超导体，其磁化曲线是不可逆的，有磁滞现象，则磁通线在交变磁场中往返运动时，需克服钉扎力和黏滞阻力作功而损耗能量并转化为热能耗散，称磁滞损耗。对处在交变电流或交变磁场中的迈斯纳态的超导体，有认为其表面并非完全光洁而有不规则之处，则该处可造成磁通穿透而有能耗，本质上也是一种磁滞损耗。另外，交变磁场感生涡旋电场，此电场使正常电子流动有欧姆损耗，称涡流损耗。

磁滞损耗 magnetic hysteresis power loss 见“交流损耗”。

涡流损耗 eddy-current power loss 见“交流损耗”。

邻近效应 proximity effects 将正常金属(N)蒸镀到超导样品(S)上，由于库珀电子对为相干长度 ξ 范围，在 S 表面的电子对渗透到 N 中厚度为 N 中相干长度 ξ_N 范围，使该范围也呈现超导电性，称邻近效应。此效应影响界面附近的能隙和临界温度均有所下降。

涨落效应 fluctuation effect 由于热力学涨落引起 GL 理论中有序参量 ψ 的涨落，因而超导物理性质也偏离原有性质统称为涨落效应。这种效应温度愈高则愈易显现。例如在临界温度 T_{c} 以上附近仍显现有超导电性，T_{c} 以下附近有正常态电阻出现，T_{c} 的转变宽度增宽，比热跃变量有变化，以及对临界磁场，临界电流等的影响。又如对第二类超导体在低于 T_{c} 温度产生有限电阻的热激活磁通蠕动等，涨落效应也是引起因素之一。一般地由 GL 方程结合统计物理涨落理论来进行对超导体涨落效应的理论研究。

超导体的非平衡性质 nonequilibrium properties of superconductors 处于非平衡态或非稳态中超导体的物性称超导体的非平衡性质。例如第二类超导体中的磁通流动性质，在交变电流或交变磁场中涡旋线的往返运动，N-S 界面的交流响应，电流涨落相关，电化学势时间相关，通直流电流下有出现超导体内的相滑，以及隧道效应中的一些非平衡性质，等等。这许多性质的研究形成了超导体动力学，其宏观性质的理论研究主要由含时 GL(TDGL)方程结合电磁学麦克斯韦方程来进行。

表面超导电性 surface superconductivity 表面超导电性是在稳恒磁场中大样品超导体在边界约束条件下发生在表面的广义低维宏观量子现象。对第二类超导体，表面超导相发生磁场 H 在 $H_{c_2}<H\leqslant H_{c_3}$，$H_{c_2}$ 和 H_{c_3} 分别是第二和第三临界磁场。对 GL 参量 K 在 $0.707>K>0.419$ 的第一类超导体，在 $H_c<H\leqslant H_{c_3}$ 时可发生稳定的表面超导相，H_c 是热力学临界磁场。对 $K<0.419$ 的第一类超导体，这时 $H_{c_3}<H_c$，则表面超导相不存在或是不稳定的。H_{c_3} 是表面刚开始出现有成核的超导相，在此又称(表面)成核(磁)场，对应的表面超导相简称成核相。在理论上，一般均用线性化的 GL 方程和 GL 边界约束条件来研究。对磁场垂直于表面的半无限空间超导体和超导平板，由于对应最低本征能量 $|\alpha|=\hbar\omega/2=E_0$ 的本征函数(序参量)ψ 自然满足边界约束条件就不显现有表面超导电性，此时表面法线方向与磁场平行。这里 $\hbar$ 为除以 2π 的普朗克常数，ω 是库珀电子对在磁场中作圆运动的圆频率，同样称朗道(Landau)频率。此时相应的临界磁场是 H_{c_2}，而非 H_{c_3}。磁场不垂直于上述样品表面时则可显现有表面超导电性，且在平行于表面的磁场中最为显著，H_{c_3} 最高，此时表面法线方向与磁场垂直，这是因为对应 E_0 的本征态 ψ 不满足边界约束条件，而另有比 E_0 更低的能值所对应的非本征态 ψ 来满足，所以存在比 H_{c_2} 更高的临界场 H_{c_3}。对超导球体，表面成核超导相发生在 $H\simeq H_{c_3}$ 赤道两边宽约 2ξ，厚约 ξ 的圆线条形区域，称表面超导鞘，即发生在其表面法线方向正好与磁场方向垂直之处及其邻近 2ξ 范围，ξ 为相干长度。随着磁场由 H_{c_3} 逐渐减小至 H_{c_2}(或 H_c)，超导鞘(准一维)向两极增宽为球带曲面(准二维)最终到达两极而样品开始转入混合态(或中间态)。两极表面法线方向与磁场方向是平行的。由此可见，表面超导相区域的变化是与这两个方向间的夹角有关的。对纵向磁场中的超导圆柱体，则表面成核相布满圆柱纵表面，对第二类超导体，一直到 H_{c_2} 以下样品转入混合态后还保持着，称超导表面壳层的持续性，乃至可保持到接近 H_{c_1}。对其他形状样品在纵向场中也有这种类似情况。对横向磁场(与 x-轴平行，圆柱中心柱轴为 z 轴)中的超导圆柱体，则表面成核相发生在极角 $\varphi=\pi/2$ 和 $3\pi/2$ 处的二个准线条形(准一维)，随着从 H_{c_3} 逐渐降低磁场，两线条各自向两边增宽为准二维柱面曲面，到接近 H_{c_2} 时，两曲面在 $\varphi=0$ 和 π 处靠拢弥合时样品转入混合态或中间态。徐龙道等在 GL 理论基础上用最概然有效约束波函数方法从理论上阐明了以上一系列实验现象和结果，并可解释任意形状大样品的成核情形。表面超导电性也是一种无能隙的超导电现象。

表面超导鞘 surface superconducting sheath 见“表面超导电性”。

超导表面壳层的持续性 persistence of superconducting surface sheath 见“表面超导电性”。

超导体的一级和二级相变 first order and second order phase transitions in superconductors 按热力学理论上对相变的分类，在相变处两相化学势相等，但一阶导数不等，因此有相变潜热发生，称一级相变；若一阶导数也相等，但二阶导数不等，则相变处有比热跃变等，但无潜热，称二级相变。实验和理论均显示，无外磁场的超导体，在临界温度 T_c 处发生的超导-正常相变比热有跃变，属二级相变。存在外磁场 H 中的第一类超导体，在 $H=H_c$ 发生的相变有潜热发生，属一级相变，但伴随着迈斯纳效应，体内磁感应 $B=B_c$(或原先 $B=0$)突发性地变为 $B=0$(或 $B=B_c$)。对处于外磁场中的第二类超导体，当 H 增加到 H_{c_1} 相变时，有一个(或极其少量)磁通线穿透样品，H 继续增加，穿透进入样品的磁通线数量逐渐增多，体内场强也增大，到 $H=H_{c_2}$ 相变开始转入正常态时，体内 $B=B_{c2}$。这与第一类超导体 $H=H_c$ 时的突发性过程不同，这里是渐变过程，反过程(也包括有磁滞的硬超导体)也是渐变的。这里在 $H=H_{c_1}$，$H=H_{c_2}$ 的相变无潜热，但比热有跃变时，属二级相

变。

顺磁效应 paramagnetic effect 计及超导体在正常相时的泡利(Pauli)顺磁性,则在外磁场 H 中正常相自由能密度有所降低,两相自由能之差应计及这种顺磁性,并不同程度地影响超导体的磁性质,称顺磁效应。在弱磁场中,这种效应可忽略不计,但在强磁场中,特别对 GL 参量 $K\gg1$ 的第二类超导体,这种效应显示就不容忽略。处在完全迈斯纳态的库珀电子对的自旋方向相反,一般地令其磁化率 $\chi_s=0$。令正常相电子顺磁磁化率为 χ_p,并将超导凝聚能与其联系,此时对应的顺磁极限磁场 $H_p(T)$ 为:

$$H_p(T)=H_c(T)/\sqrt{\chi_p}$$

$H_c(T)$为热力学临界磁场。对第一类超导体计及顺磁效应对应的 H_c^* 是:

$$H_c^*=\left(\frac{1}{H_c^2}+\frac{1}{H_p^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$$

一般地 $H_p\gg H_c$,故可忽略泡利顺磁性。对 $K\gg1$ 的第二类超导体,第二临界磁场 H_{c_2} 也大,此时在 $T=0$K 对应的 $H_{c_2}^*$ 为:

$$H_{c_2}^*(0)=\frac{H_{c_2}(0)H_p(0)}{[2H_{c_2}^2(0)+H_p^2(0)]^{\frac{1}{2}}}$$

对应的第三临界磁场 $H_{c_3}^*(0)$,只需将上式中 $H_{c_2}(0)$更改为 $H_{c_3}(0)$即得。

顺磁极限磁场 paramagnetic limited magnetic field 见"顺磁效应"。

超导体小样品 small specimens of superconductors 一般称超导体某一尺度 $d\leqslant\delta_0$ 的样品为超导体小样品,δ_0 是弱磁场穿透深度,d 可表示为平板或薄膜的半厚度和圆柱体与球体的半径等。在有附加条件 $d<\xi$ 时(ξ 为相干长度),则不论第一类和第二类超导体,大样品的中间态,混合态和表面超导电性,对小样品言就难于形成或不存在,所以大样品的三个临界磁场 H_{c_1},H_{c_2}和 H_{c_3}对小样品言也失去原有的含义。对应第一类超导体的相变临界场 H_c,小样品的相变临界场现用 H_{K_1}来表示。理论和实验均证实,对单连通超导体的 H_{K_1}比 H_c 要高,甚至高很多,金兹堡(Ginzburg)将 $(Kd/\delta_0)^2\ll1$ 的样品视为小样品,K 是 GL 参量,理论给出存在样品的临界尺寸 d_K。$d<d_K$ 时,在 H_{K_1} 的超导-正常相变为二级相变,$d>d_K$ 时为一级相变,d_K 是一级和二级相变的样品尺寸分界。在一级相变情形中,当 H 逐渐增加至 $H_{K_2}>H>H_K$ 时,还可存在亚稳的超导相(态),称超导态的过热相,简称过热态;而当 H 逐渐减小至 $H_{K_1}<H<H_K$ 时,还可存在亚稳的正常相(态),称正常态的过冷相,简称过冷态。在亚稳相区均称滞后现象。这里 H_{K_2}和 H_{K_1}现在分别称过热临界磁场和过冷临界磁场,H_K 称平衡相变临界磁场,是一级相变。$H>H_{K_2}$时样品整体处于正常态(相),$H<H_{K_1}$时处于超导态(相)。对超导体小样品的电磁性质一般用 GL 理论来研究(以上小样品性质可参见对"超导薄膜"理论研究的图示结果)。

临界尺寸 critical size 见"超导体小样品"。它也是超导电性尺寸效应物性呈现的标志。由 GL 理论所得的若干结果如下:

厚为 $2d$ 的超导薄膜,磁场平行于膜面:

$$d_K=\sqrt{5}\,\delta_0/2$$

半径为 r 的超导球体:

$$r_K=\sqrt{21}\,\delta_0/2$$

纵向和横向磁场中半径为 r 的超导圆柱体均为:

$$r_K=\sqrt{3}\,\delta_0$$

对于"长轴半径 $a\gg$短轴半径 b"的超导椭球体,在纵向磁场中:

$$L_K\equiv b=\sqrt{3/2}\,\delta_0$$

在横向磁场中:

$$L_K\equiv\sqrt{ab}=\sqrt{7/\pi}\,\delta_0$$

亚稳超导相 metastable superconducting phase 见"超导体小样品"和"超导薄膜"。

亚稳正常相 metastable normal phase 见"超导体小样品"和"超导薄膜"。

过热态 super-heated state 见"超导体小样品"和"超导薄膜"。

过冷态 super-cooled state 见“超导体小样品”和“超导薄膜”。

滞后现象 hysteresis 见“超导体小样品”和“超导薄膜”。

平衡相变临界磁场 critical magnetic field of equilibrium phase transition 见“超导体小样品”和“超导薄膜”。

过热临界磁场 super-heated critical magnetic field 见“超导体小样品”和“超导薄膜”。

过冷临界磁场 super-cooled critical magnetic field 见“超导体小样品”和“超导薄膜”。

小样品临界磁场 critical magnetic field of small specimens 在小样品尺寸 $d=d_K$ 附近，d_K 为临界尺寸，$d<d_K$ 的样品只存在小样品临界磁场 H_{K_1}，这时超导-正常相变为二级相变。$d>d_K$ 的样品，在平衡临界磁场 H_K 的上下存在过热临界磁场 H_{K_2} 和过冷临界磁场 H_{K_1}，在 H_{K_2} 和 H_{K_1} 间存在滞后现象，相变属一级相变。现列举一些小样品临界磁场 H_{K_1} 如下：

对于厚为 $2d$ 的超导薄膜，在平行于膜面磁场中为：

$$H_{K_1}/H_{KM}=\sqrt{6}\,\delta_0/d$$

对于纵向磁场中半径为 r 的超导圆柱体：

$$H_{K_1}/H_{KM}=4\,\delta_0/r$$

对于横向磁场中半径为 r 的超导圆柱体：

$$H_{K_1}/H_{KM}=\sqrt{8}\,\delta_0/r$$

对于半径为 r 的超导球体：

$$H_{K_1}/H_{KM}=2\sqrt{5}\,\delta_0/r$$

对于“长轴半径 $a\gg$ 短轴半径 b”的超导椭球体，在纵向磁场和条件 $b<\delta_0$ 时：

$$H_{K_1}/H_{KM}=\sqrt{20}\,\delta_0/b$$

在横向磁场和条件 $\sqrt{\pi ab}<2\delta_0$ 时：

$$H_{K_1}/H_{KM}=\sqrt{20}\,\delta_0/a$$

这里 H_{KM} 和 δ_0 分别是大样品的热力学临界场和弱磁场穿透深度。由于 d 和 r 等均小于 δ_0，乃至可小得很多，所以 H_{K_1} 比 H_{KM} 要大，乃至大很多。

超导薄膜 superconducting film 在平行于膜表面外磁场 H_0 中厚为 $2d$ 的小样品超导薄膜，由 GL 理论研究给出临界尺寸 $d_K=\sqrt{5}\,\delta_0/2=1.12\,\delta_0$ 和 $d<d_K$ 时的小样品临界磁场 $H_{K_1}=\sqrt{6}\,\delta_0 H_{KM}/d$（$d>d_K$ 时 H_{K_1} 称过冷临界磁场），这里 δ_0 和 H_{KM} 分别为对大样品言的弱场穿透深度和热力学临界磁场。在 $d=d_K$ 附近，金兹堡(V.L.Ginzburg)给出的研究结果用图示表示在图 1～图 4 上，图中符号 F_{SH} 和 F_{nH} 分别是磁场中超导相和正常相的自由能密度，M 和 ψ_0 分别表示磁化强度和约化 GL 有序参量。

图 1 是 $d<d_K$ 的情形。在 $\psi_0\neq 0$ 时，两相自由能密度之差 $F_{SH}-F_{nH}$ 有极小值，且因 $F_{SH}<F_{nH}$，所以超导相是稳定的。随着 H_0 的增大，极小值对应的 ψ_0 值减小，到达 $H=H_{K_1}$ 时，极小值对应的 $\psi_0=0$，样品转入正常态。整个过程没有滞后现象，在 $H=H_{K_1}$ 时的相变为二级相变。

图 2 是 $d>d_K$ 的情形，H_0 增大在 $H_0<H_{K_1}$ 时只有极小值，超导相是稳定的。$H_0=H_{K_1}$ 时在 $\psi_0=0$ 处隐含有极大值。H_0 在 $H_{K_2}>H_0>H_{K_1}$ 之间，在 $\psi_0\neq 0$ 时则既有极小值，又有极大值，但 $F_{SH}<F_{nH}$ 时的极小值处的超导相仍是稳定的。$F_{SH}=F_{nH}$ 时的极小值对应的临界场 H_K 称平衡临界磁场，对应于 $\psi_0=\psi_{0K}$，这时的 H_K 是超导稳定相与亚稳相的边界。H_0 再增大在 $H_{K_2}>H_0>H_K$ 之间时，$F_{SH}>F_{nH}$，此时极小值的超导相是亚稳的。$H=H_{K_2}$ 时极小值消失，样品从 $\psi_0\neq 0$ 跃入 $\psi_0=0$ 的正常相。H_{K_2} 称过热边界或过热临界磁场。相反过程，即样品处于正常态时减小磁场 H_0 到 H_{K_2} 以下，但 $F_{SH}>F_{nH}$，此时 $\psi_0=0$ 的正常相是稳定的。再减小至 $H_0=H_K$ 时，$F_{SH}=F_{nH}$。再减小在 $H_{K_1}<H_0<H_K$ 时，$F_{SH}<F_{nH}$，但 $\psi_0=0$ 的态比其旁边 $\psi_0\neq 0$ 的极大值所对应的态的能量要低，所以还可以出现 $\psi_0=0$ 的亚稳的正常相，故这里的 $H_0=H_K$ 又是稳定的正常相和亚稳正常相的分界。再减小到 $H_0=H_{K_1}$，极大

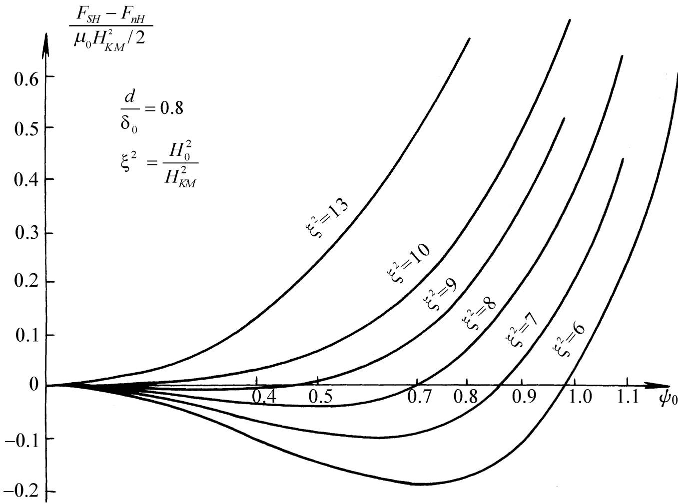


图 1

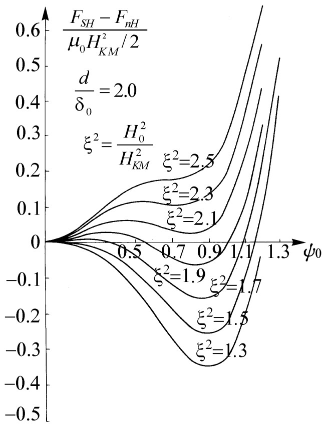


图 2

值消失，亚稳正常相也不存在，样品转入只存在极小值对应的稳定的超导相。现在的 H_{K_1} 称过冷边界或过冷临界磁场。所以在这两种过程中，有亚稳相出现，在 $H_K < H_0 < H_{K_2}$ 区间可存在亚稳超导相，在 $H_K > H_0 > H_{K_1}$ 区间可存在亚稳正常相。所以 H_K 又是亚稳超导相和亚稳正常相的边界。见图 3。出现亚稳相的相变是一级相变。$d < d_K$ 时没有亚稳相(态)存在，$d > d_K$ 才可有亚稳相(态)出现，所以 d_K 是一级和二级相变的样品尺寸临界值，称临界尺寸。

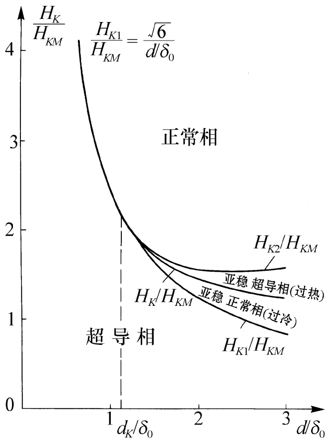


图 3

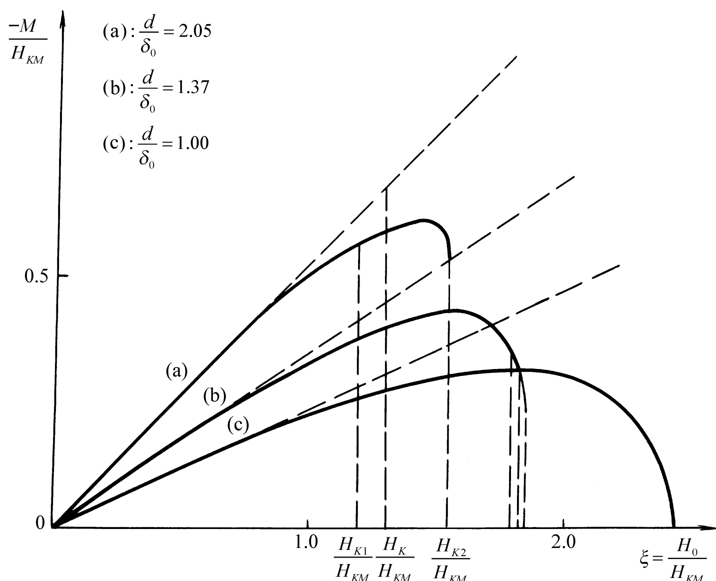


图 4

超导薄膜以上所描述的磁性质，在样品磁化曲线图 4 上也正确地反映出来。

全磁通守恒 fluxoid conservation 一个多连通超导体内每一个孔的冻结磁通是量子化的。为简单起见考虑只有一个孔。设环绕该孔的闭合曲线为 C，由 GL 理论可得：

$$\phi_L=\oint_C\left[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})+\frac{m}{2e^2\,|\,\psi(\boldsymbol{r})\,|^2}\cdot\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})\right]\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}\tag{1}$$

式中 ϕ_L 为孔所冻结的全磁通，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ 为矢势，m 和 e 为电子质量与电荷，$\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$ 是超电流密度，而 GL 序参量 $|\psi(\boldsymbol{r})|^2=n_s$ 为超导电子对数密度，$\psi(\boldsymbol{r})=|\psi(\boldsymbol{r})|\,e^{i\varphi(\boldsymbol{r})}$ 为复量。由 GL 电流方程可将上式化为：

$$\phi_L=\frac{\hbar}{2e}\oint_C\nabla\phi(\boldsymbol{r})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{l}$$

$$=\frac{\hbar}{2e}[\phi(\boldsymbol{r}_p)]$$

P 为 C 上任意选定的点，$[\phi(\boldsymbol{r}_p)]$ 表示从 $\boldsymbol{r}_p$ 出发环绕 C 一周又回到 $\boldsymbol{r}_p$ 后 $\phi(\boldsymbol{r}_p)$ 数值的改变。由于 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是 $\boldsymbol{r}$ 的单值函数，故 $[\phi(\boldsymbol{r}_p)]=2\pi n$，$n$ 为整数。于是

$$\phi_L=n\phi_0\tag{2}$$

$\phi_0=h/2e=2.07\times10^{-15}$ 韦伯为磁通量子，因此全磁通是量子化的。由于 $n\phi_0$ 是常数，则 ϕ_L 不随时间变化，是守恒的，称全磁通守恒。例如初始时刻孔的磁通 $\Phi_L=0$ 或 $n\phi_0(n\neq0)$，则由式(1)和(2)，没有附加条件，则不论外加或撤去磁场，或有电流 $\boldsymbol{j}_s$，以后仍保持孔的磁通 $\Phi_L=0$ 或 $n\phi_0(n\neq0)$，保持守恒。

磁场中的空心超导体 hollow superconductors in magnetic field 磁场中空心超导体也分复(多)连通和单连通两类。若在样品实体部分中任取包围贯通样品中空部分回路，从几何上讲回路不能收缩为点是复连通，若有磁通存在也同样是贯通回路的，则对磁通也是复连通，若磁通未贯通回路，则是单连通，其磁行为与单连通空心体类似。例如空心球体，空心椭球体，它们虽有中空部分，但外壳层是封闭的，没有贯通样品的孔，从几何上和对磁通讲均为单连通。又如空心超导圆柱体，虽有贯通柱体的空心部分，几何上是复连通，但在垂直于柱

轴的磁场中，薄壁样品磁通穿透进入空腔的横向场与回路面是平行的，磁场未贯通回路，则其磁性质与单连通空心体类似。但若磁场平行于柱轴，则对磁通讲也是复连通的。磁场中的复连通超导体可有量子化的冻结磁通现象。空心超导体随着壁壳层厚度与弱场穿透深度相比拟的厚薄程度不同，其磁性质也有异，即有样品尺寸效应等等性质的差异，也有大小两种样品的区分。这些空心超导体（单连通和复连通，大样品和小样品）的宏观性质，包括宏观量子性质，均可用 GL 理论来进行研究。

超导环 superconducting ring 垂直于环面磁场中的超导环是复连通超导体，遵守全磁通守恒，其冻结磁通是量子化的，环上有无阻持久电流以维持冻结磁通不变，可作为磁能储存和永久类磁体使用等。

空心超导球体 hollow superconducting sphere 设内外半径分别为 r_1 和 r_2（$r_1 \leqslant r \leqslant r_2$），壁厚 $d = r_2 - r_1$ 的第一类超导体的空心球体处于外磁场强度 H_0 中。令 $\zeta = r/\delta$，$\Delta = d/\delta$，$\delta = \delta_0/\psi$，δ_0 为大样品弱磁场穿透深度，ψ 是有序参量。设 H_1 和 M 分别是空腔中磁场强度和样品磁矩。按 GL 理论，徐龙道和 Zharkov 给出的部分主要结果如下：

$\zeta_1 \gg 1$ 和 $\Delta \gg 1$ 时，

$$H_1 = 6H_0 \zeta_2 \zeta_1^{-2} e^{-\Delta},$$

$$M = -H_0 r_2^3 (1 - 3\delta/r_2)/2$$

所以对厚壁样品，腔内 $H_1 \simeq 0$，只要 H_0 低于临界磁场，球壳层可视为磁屏蔽物，样品可利用为磁屏蔽体。对 $\zeta_1 \gg 1$，$\Delta \ll 1$ 的情形，则

$$H_1 = H_0/(1 + \zeta_1 \Delta/3),$$

$$M = -H_0 r_2^3 [1 - 1/(1 + \zeta_1 \Delta/3)]/2$$

可见，若 $\zeta_1 \Delta \gg 1$，则 $H_1 \ll H_0$ 或 $H_1 \simeq 0$。所以，虽然 $d \ll \delta$，但磁场仍被屏蔽而很难透入空腔，称 $\zeta_1 \Delta/3$ 为空心超导球体的屏蔽因子。相反，$\zeta_1 \Delta \ll 1$，则 $H_1 \approx H_0$，球壳层几乎不起屏蔽磁场的作用。对 M 讲，也可作同样讨论。此外，类似于实心小样品，也可求出各种临界磁场 H_{K_1}，H_K，H_{K_2} 和临界尺寸等。

横向磁场中的空心超导圆柱体 hollow superconducting cylinder in a transversal magnetic field 垂直于柱轴（横向）磁场 H_0 中的空心超导长圆柱体就其磁性质讲是单连通超导体。徐龙道和 Zharkov 由 GL 理论给出中空部分的磁场强度 H_1 和样品单位长度磁矩 M 的完整解式，而在 $\zeta_1 \gg 1$ 和 $\Delta \gg 1$ 条件下为：

$$H_1 = \frac{4H_0}{\zeta_1} \sqrt{\frac{\zeta_2}{\zeta_1}} e^{-\Delta},$$

$$M = -\frac{H_0}{2} r_2^2 \left(1 - \frac{2}{\zeta_2}\right)。$$

这里 r_1 和 r_2 分别为空心柱体的内、外半径，$d = r_2 - r_1$ 为柱壁厚度，$\zeta = r/\delta$（$r_1 \leqslant r \leqslant r_2$），$\Delta = d/\delta$，$\delta = \delta_0/\psi$，$\delta_0$ 为大样品弱磁场穿透深度，ψ 是有序参量。显然此时 $H_1 \to 0$，$M \to -H_0 r_2^2/2$，样品可用作磁屏蔽体。当 $\zeta_1 \gg 1$，$\Delta \ll 1$ 时，则

$$H_1 = H_0/(1 + \zeta_1 \Delta/2),$$

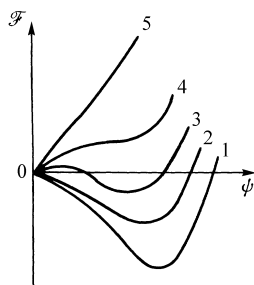
$$M = -H_0 r_2^2 [1 - (1 + \zeta_1 \Delta/2)^{-1}]。$$

若 $\zeta_1 \Delta \gg 1$，则 $H_1 \ll H_0$ 或 $H_1 \approx 0$。所以，虽然 $d \ll \delta$，但磁场几乎为薄壁所屏蔽而难于透入空心，称 $\zeta_1 \Delta/2$ 为横向磁场中空心长圆柱体的屏蔽因子。当 $\zeta_1 \Delta \ll 1$ 时，则 $H_1 \approx H_0$，磁场穿透薄壁而均进入空腔，失去屏蔽作用，此时 $M \approx 0$。类似于实心小样品，由 GL 理论可求出薄壁样品的临界磁场 H_{K_1}，H_K，H_{K_2} 和临界尺寸等。

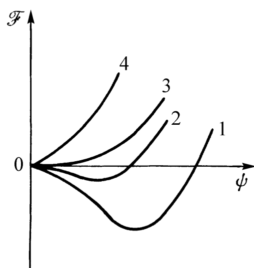
纵向磁场中的单层空心超导圆柱体 single hollow superconducting cylinder (SSC) in a longitudinal magnetic field 平行于柱轴（纵向）磁场 H_0 中的单层空心超导长圆柱体（SSC）是复连通超导体。设柱体内外半径分别为 r_1，r_2（$r_1 < r < r_2$），厚度 $d = r_2 - r_1$，$\zeta = r/\delta$，$\Delta = d/\delta$，$\delta = \delta_0/\psi$，δ_0，ψ 分别为大样品弱场穿透深度和有序参量。由 GL 理论，徐龙道和 Zharkov 研究了一系列物性，其中对厚壁样品，磁场难于透入中空部分而只存在原有的量子化冻结磁通。对 $\zeta_1 \gg 1$，$\Delta \ll 1$ 的薄壁样品，腔内磁场 H_1 和样品磁矩 M 分别为：

$$H_1 = \frac{H_0 + (n\phi_0/\pi r_1^2)\zeta_1 \Delta/2}{1 + (\zeta_1 \Delta/2)}$$

$$M = -\frac{r_2^2 \zeta_1 \Delta (H_0 - n\phi_0/\pi r_1^2)}{8[1 + (\zeta_1 \Delta/2)]}$$



(a)



(b)

图 1 单层空心超导体的热力学函数

(a) 一级相变;(b) 二级相变

这里 n 为磁通量子数,$\phi_0 = h/2e = 2.07 \times 10^{-15}$Wb。是磁通量子,$h$ 和 e 分别为普朗克常数和电子电荷量。若原先空腔中无冻结磁通($n=0$),则腔中磁场是外场 H_0 穿透进入。若 $\zeta_1\Delta \ll 1$,则 $H_1 \approx H_0$,磁场可几乎全穿透到空腔。薄壁不起屏蔽磁场的作用。但若 $\zeta_1\Delta \gg 1$,则 $H_1 \approx 0$,所以虽然 $d \ll \delta$,但外场仍难于进入空腔而被壁所屏蔽,称 $\zeta_1\Delta/2$ 为纵向外场中单层空心长圆柱体的屏蔽因子。对 M 也可作同样分析。与实心超导小样品类似(见"超导薄膜"),可用与 ψ(对坐标的平均),H_0, n,温度 T 和样品尺寸 l 有关的超导-正常两相吉布斯自由能密度之差 $\mathscr{F}(\psi, p)$用 GL 理论来进行研究分析相变行为及其他一系列物性,如各种临界磁场,临界尺寸等等。这里 H_0, n, T 和 l 在 $\mathscr{F}$宗量中统一记写为 p 来表示。SSC 系统的一、二级相变见图 1。随着 H_0 或 T 的增加,图线由 1 逐渐上升到 4 和 5。图 1(a)的 1,2,3 三曲线在 $\psi>0$ 上存在 $\mathscr{F}<0$ 的极小值,超导态是稳态,在 3 与 4 曲线之间可有 $\mathscr{F}>0$ 和 $\psi>0$ 的极小值(图中未画出),则超导态是亚稳的过热(sh)态。曲线 4 上有 $\mathscr{F}>0$, $\psi>0$ 的拐点,是超导态的过热边界。稍上,样品即跳跃到 $\psi=0$ 的正常态或量子跃迁到不同 n 值的 $\psi>0$ 的超导态。再往上,如图线 5,$\mathscr{F}$的最小值在 $\psi=0$,样品完全处于正常态。相反过程,减小 H_0 或 T,图线由 5 的处于 $\psi=0$ 的稳定正常态,并维持 $\psi=0$ 到图线 4,在图线 3 上,极大值在 $\mathscr{F}>0$ 和极小值在 $\mathscr{F}<0$ 与 $\psi>0$ 处,此时 $\psi=0$ 的正常态是亚稳的过冷(SC)态。继续减小 H_0 或 T,在极大值开始消失只存在极小值时,$\psi=0$ 的正常态是过冷边界。再往下,样品处于完全的超导态。由于有过热和过冷滞后现象,相变属一级相变。图 1(b)则无滞后现象,相变属二级相变。

Arutunian 和 Zharkov 在此基础上又细致地作了进深的一系列研究,例如所给出的图 2(a),这里取 $T=0$K 的相干长度 $\xi_0 = 1\times10^{-7}$m,GL 参量 $K=0.2$, $r_1 = 6\times10^{-7}$m, $r_2 = 8\times10^{-7}$m,图中 $t = T/T_c$, $\phi_{a1} = \pi r_1^2 H_0/\phi_0$, ϕ_{tc}表示在图 1(a)上拐点所对应的量,用箭头所指表示,实线是过冷边界 ϕ_{sc},虚线是过热边界 ϕ_{sh},平方规律的包络线类同于图 2(b)的块样品的热力学临界磁场 $H_c(T)$的相图曲线,但图 2(a)体现了外场穿透薄壁而形成磁通量子的跃入空腔的过程和滞后现象。又例如对二级相变的比热随外场和量子数 n 跃迁振荡情形见图 3。图中 $\tilde{c} = \Delta c/c_0$, $\Delta c = c_s - c_n$, $c_0 = \mu_0 H_{cn}^2(0)/T_c$, μ_0 为真空磁导率,$H_{cn}(0)$是 $T=0$K 时对应于 n 的热力学临界场,c_s 和 c_n 分别是超导态和正常态的比热。图 3(a)(实线)和(b)(虚线)分别是对应清洁和脏超导体薄壁样品的。在 n 超导态磁通跃迁进入 $n\pm1$ 超导态过程中经历有正常态时,则进入 $n\pm1$ 超导态称超导态的重入,或一般地进入正常态后又进入超导态也称超导态的重入。

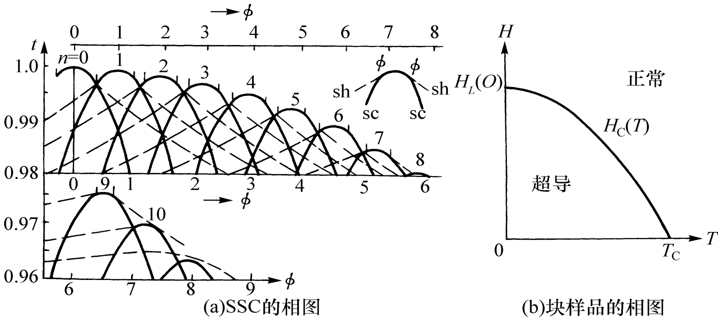


图 2

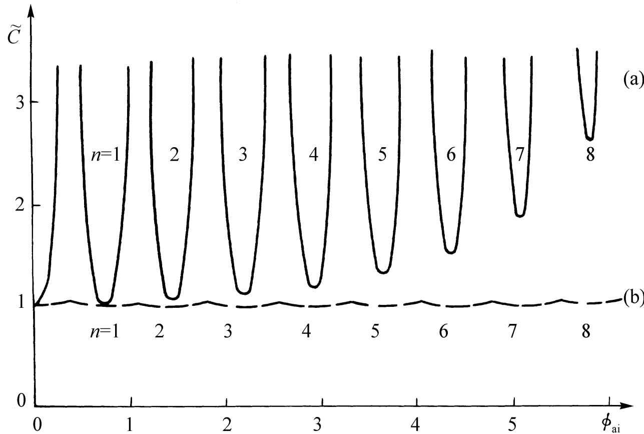


图 3

纵向磁场中两个共轴空心超导圆柱体(DSC)系统　the system of dual coaxial hollow superconducting cylinders (DSC) in a longitudinal magnetic field　在纵向磁场 H_0 中的两个共轴空心超导圆柱体之间夹一层绝缘层的系统,只要绝缘层足够薄,可同时展现出电阻消失,迈斯纳效应,磁通量子化和约瑟夫森隧道效应四种超导电性基本现象的共存。例如在超导态重入过程中也可显现。设内、外超导圆柱层所围区域进入磁场的磁通量子数分别是 n_1 和 n_2,则总是有 $n_2 \geqslant n_1$。又设内外两超导圆柱层的序参量分别为 ψ_1 和 ψ_2,由于 ψ_1 和 ψ_2 间的耦合作用和逆磁性的迈斯纳效应,以及 n_1, n_2 跃迁等之间的关联,使 DSC 系统变得复杂。王思慧和徐龙道等基于 GL 理论较为广泛地研究了 DSC 系统的一系列物性,指出 n_1 和 n_2 的量子跃迁只在狭区内发生且有选择性,而隧道效应也只发生在更狭区域的 $n_1 = n_2$ 的情况等等。图 1 取轴心中空部分半径,也是第一超导圆柱层的内半径 $r_1 = 4 \times 10^{-7}$m,其外半径,也是绝缘层的内半径 $r_2 = 5 \times 10^{-7}$m,绝缘层外半径,也是第二超导圆柱层的内半径 $r_3 = 5.5 \times 10^{-7}$m,其外半径 $r_4 = 6.5 \times 10^{-7}$m,GL 参量 $K = 0.2$, $T = 0$K 时的相干长度 $\xi_0 = 10^{-7}$m,图 1 中所显示的系统吉布斯自由能随外场 H_0 的关系,就可得知状态(n_1, n_2)的跃迁选择性。

随着 H_0 的增大，系统磁通量子态的跃迁变化是：(0,0)→(1,1)→(1,2)→(2,3)→(2,4)→…，而(0,1)，(2,2)，(1,3)，(3,4)等是不稳定的亚稳态，其他状态是不可能存在的。

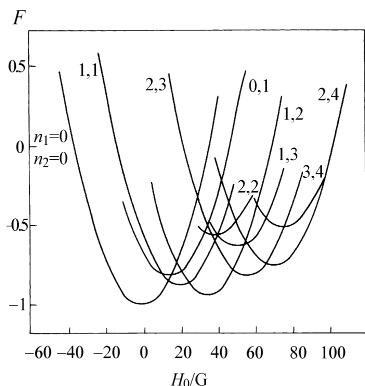


图 1

图 2 和图 3 分别表示内空腔磁场强度 H_1 和绝缘圆柱层磁场强度 H_2 随外场强度 H_0 变化时的跃迁情况。

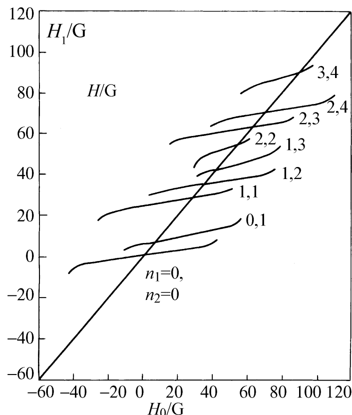


图 2

对薄层样品，这里有内外两个屏蔽因子，起有与 SSC 系统类同的作用。

纵向磁场中多个共轴空心超导圆柱体（NSC）系统 the system of a number of coaxial hollow superconducting cylinders（NSC）in a longitudinal magnetic field 这里是指多层空心超导圆

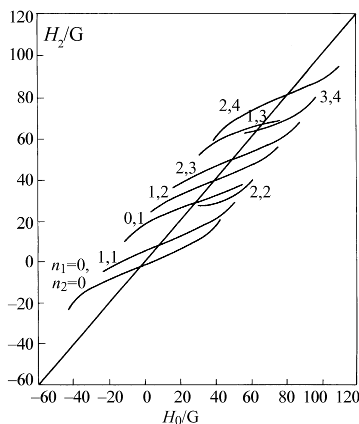


图 3

柱体，两相邻超导圆柱层间均夹有绝缘圆柱层，最外层是超导层，轴心空腔是绝缘物。设轴心向外各超导层所包围的磁通量子数分别为 $n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots, n_N$，即共有 N 个超导圆柱层（$i=1,2,\cdots,N$）。

基于 GL 理论，王思慧和徐龙道计及层间的耦合作用等，给出系统存在冻结磁通时的总自由能可表示成一个简洁的形式：

$$\mathscr{F} = \frac{1}{2}\sum_i \sum_j L_{ij} I_i I_j = \frac{1}{2}\sum_i I_i \phi_i,$$

$$\phi_i = \sum_{j=1}^{N} L_{ij} I_j = n_i \phi_0$$

这里 ϕ_0 为磁通量子，I_j 是第 j 层超导圆柱层上的总角向电流，$\phi_i = \sum_{j=1}^{N} L_{ij} I_j$ 是类似于正常的 N 个共轴螺旋管系统第 i 层所围的总磁通形式，但其意义与这里情形是不同的。类比之下，当 $i=j$ 时的 L_{ij} 称类自感系数，$i\neq j$ 时的 L_{ij} 称类互感系数。例如这里对单层空心超导圆柱体（SSC）系统，则 $i=j=1$，此时给出为：

$$L_{11} = \frac{4\pi^2 r_1^2 [I_0(\zeta_2) K_2(\zeta_1) - K_0(\zeta_2) I_2(\zeta_1)]}{I_0(\zeta_2) K_0(\zeta_1) - K_0(\zeta_2) I_0(\zeta_1)}$$

其中 $\zeta = r\psi/\lambda$，ψ 和 λ 分别是 GL 有序参量和弱磁场穿透深度，r_1 和 r_2 是超导层的内、外半

径，$I_n(\zeta)$和 $K_n(\zeta)$是虚宗量贝赛尔函数。在同时存在有外磁场时，$\mathscr{F}$的具体形式则要复杂些。由$\mathscr{F}$可研究 NSC 系统的一系列复杂的物理性质。

屏蔽因子 shielded factor 见“空心超导球体”，“横向(纵向)磁场中的空心超导圆柱体”。

尺寸效应 effect of size 与穿透深度或相干长度可相比拟的实心和空心超导体(如壁和膜的厚度)，它们的物性状态，如电磁性质，相变，状态的稳定性，磁通量子跃迁等等与样品尺寸大小也有关。最显著的如临界尺寸，屏蔽因子等所呈现的特征。样品这种尺寸改变有较明显地影响物性的情形称超导电性质的尺寸效应。

超导态的重入 again on transition to superconducting state 见“纵向磁场中的单层空心超导圆柱体(SSC)”。

类自感系数 coefficient of analogous self-induction 见“纵向磁场中多个共轴空心超导圆柱体(NSC)系统”。

类互感系数 coefficient of analogous mutual induction 见“纵向磁场中多个共轴空心超导圆柱体(NSC)系统”。

同位素效应 isotope effect 实验表明，超导体的临界温度 T_c 也与同位素的质量 M 有关，称同位素效应。经验规律可表示成：

$$T_c M^{\beta} = \text{常数}$$

对 Hg，Tl 等超导元素 $\beta \approx 1/2$。由于表征晶格振动的固体德拜(Debye)频率 ω_D 或德拜温度 T_D 与 M 关系为 $kT_D \propto M^{-1/2}$，k 为玻尔兹曼常数，故 T_c 与 T_D 或 ω_D 成正比，则 T_c 也与晶格振动有关。这对电子-声子相互作用的超导电性机制具有重要价值。基于此机制的 BCS 理论给出了 T_c 公式，在弱耦合情形下与实验符合较好，但对非过渡超导元素的 β 对 1/2 的偏离要大些，需用强耦合理论来修正。

库珀问题 Cooper's problem 在电子填满费米球的球面附近加进两个电子，它们的动量大小相等，方向相反，质心动量为零，库珀利用动量空间泡利(Pauli)条件和电子态的贝特-戈德斯通(Bethe-Goldstone)方程来研究分析此两电子互作用势$(-V)$($V>0$ 是吸引)是吸引的问题称库珀问题。在弱相互作用极限下，$N(0)V \ll 1$，给出从费米能算起的这对电子态的能量为：

$$E = -2\hbar\omega_D e^{-2/N(0)V}$$

这里 $N(0)$是 $T=0$K 时费米面的态密度，$\hbar$ 和 ω_D 分别表示除以 2π 的普朗克常数和德拜(Debye)截止频率。上式表明存在 $E<0$ 的一对电子的束缚态，其能量比正常态的低，所以成对电子态比正常态要稳定。对排斥作用情形($V<0$)，则不存在 $E<0$ 的束缚态解。

库珀电子对 Cooper electron pairs 简称库珀对。库珀假设超导体物质的详细结构不影响超导态的定性特征而可忽略能带与晶体结构，采用在正常态下电子形成各向同性动量空间费米球分布。在超导态时，费米球内电子与正常态的一样，但在费米面附近的电子，存在净的吸引力作用时，费米海是不稳定的，形成动量和自旋各自大小相等，方向相反的成对的一对对电子对，它们类似于凝聚的玻色粒子，称库珀对，是一种无阻的超流电子，且无论吸引多么微弱，也易于形成束缚的电子对，哪怕数量是很少。按 BCS 理论，此时在费米面形成宽为 $2\Delta(T)$的能隙，拆散库珀对就需引入相应的能量。在温度 $T=0$K 时，费米面附近的电子均结成为库珀对。在有限温度下，能隙随温度升高而逐渐变狭，部分库珀对被热激发成为单个电子，即正常电子。到达临界温度 T_c 时，$\Delta(T_c)=0$，库珀对电子全都拆散为正常电子，样品转入正常态。

对近似 pairing approximation 在多电子系统涉及的两体相互作用，若只研究以特殊形式配对电子之间的互作用称对近似。如电子配对的库珀对起主导作用的对近似也称 BCS 近似，在此基础上可建立 BCS 的“配对哈密顿”或“简化哈密顿”和 BCS 基态波函数。

BCS 理论 BCS—“Bardeen, Cooper, Schrieffer” theory 这是美国物理学家巴丁(J. Bardeen)，库珀(L. N. Cooper)和徐瑞弗(J. R. Schrieffer)(简称 BCS)于 1957 年提出的、后为公认的超导电性微观理论，用电-声子机制解

释了超导电性的成因和一系列物性，为此，他们于1972年获得诺贝尔物理学奖。

他们指出，晶体中电子和声子间的相互作用是基础，并对超导电性起主要作用，这个基础即电-声子机制的所在。当有关电子态间的能量差小于声子能量 $\hbar\omega$ 时，电子间由于交换虚声子所产生的相互作用是吸引的，这种吸引超过电子间排斥的屏蔽库仑作用时仍有净的有效吸引，这就有利于形成超导相，且在费米面(海)附近形成束缚的库珀电子对时(参见"库珀电子对")，电子间具有最强的净吸引力。按此，晶体电子系统由BCS理论给出的对近似配对哈密顿(BCS哈密顿)可表示为：

$$\mathscr{H}=\sum_{\boldsymbol{K}\sigma}\varepsilon_{\boldsymbol{K}}n_{\boldsymbol{K}\sigma}-\sum_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}V_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}C^{+}_{\boldsymbol{K}'\uparrow}C^{+}_{-\boldsymbol{K}\downarrow}\cdot C_{-\boldsymbol{K}\downarrow}C_{\boldsymbol{K}'\uparrow},$$

而BCS基态波函数

$$|\psi\rangle_0=\prod_{\boldsymbol{K}}(u_{\boldsymbol{K}}+v_{\boldsymbol{K}}C^{+}_{\boldsymbol{K}\uparrow}C^{+}_{-\boldsymbol{K}\downarrow})|0\rangle$$

式中 $\boldsymbol{K}$，σ 分别为电子的波矢和自旋，$\uparrow$，$\downarrow$ 为两个相反方向自旋，$\varepsilon_{\boldsymbol{K}}$是以费米面为零点的电子动能，$n_{\boldsymbol{K}\sigma}=C^{+}_{\boldsymbol{K}\sigma}C_{\boldsymbol{K}\sigma}$为粒子数算符，$C^{+}$和 C 分别为产生和湮灭算符，$V_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}>0$ 表示为净相互作用吸引势矩阵元，$|0\rangle$为真空态，$u_{\boldsymbol{K}}$和 $v_{\boldsymbol{K}}$ 分别表示对态($\boldsymbol{K}\uparrow$，$-\boldsymbol{K}\downarrow$)空着的和占有的概率振幅，并由$|\Psi\rangle_0$的归一化要求给出 $u^2_{\boldsymbol{K}}+v^2_{\boldsymbol{K}}=1$，且有：

$$u^2_{\boldsymbol{K}}=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{K}}}{E_{\boldsymbol{K}}}\right),$$

$$v^2_{\boldsymbol{K}}=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{K}}}{E_{\boldsymbol{K}}}\right)$$

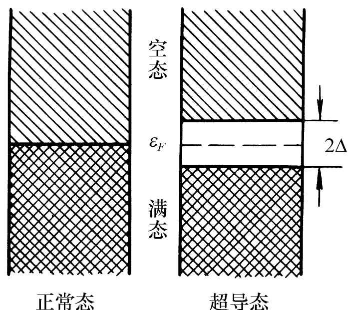
这里

$$E_{\boldsymbol{K}}=(\varepsilon^2_{\boldsymbol{K}}+\Delta^2)^{\frac{1}{2}}$$

为准粒子(正常电子)能量，也称激发能，其对应的态称激发态，$\Delta(T)$为与温度 T 有关的能隙参量，同时系统在 $T=0\mathrm{K}$ 时的基态能量为：

$$E_s(0)=\sum_{\boldsymbol{K}}[\varepsilon_{\boldsymbol{K}}-(\varepsilon_{\boldsymbol{K}}+\Delta^2(0))^{\frac{1}{2}}]+\frac{\Delta^2(0)}{V}$$

这里用了常量(平均)近似 $V_{\boldsymbol{K}\boldsymbol{K}'}=V$，而$\mathscr{H}$中的 V 包括电-声子吸引相互作用势 V_{ph}和屏蔽库仑排斥的相互作用势($-V_c$)。在有限温度 T 时用 $\Delta(T)$代入即有 $E_S(T)$和 $E_{\boldsymbol{K}}(T)$。所以，样品进入超导态时出现有 $2\Delta(T)$的能隙，见图，图中 ε_F 为费米能。



电-声子机制的BCS理论解释了库珀对电子散射对晶体无能耗，呈现无热效应的无阻(电阻为零)超导现象，并解释了同位素效应，比热跃迁呈现的二级相变，给出了临界温度 T_c 公式和能隙方程，热力学临界磁场，并在弱磁场中的迈斯纳效应，伦敦方程，皮帕德非局域方程，穿透深度，以及它们随温度变化的关系等等，这些结果与不少超导体材料的实验结果相符。但公式和方程的给出限于弱耦合情形，即当 $N(0)V\ll1$ 的情况。这里 $N(0)$为 $T=0\mathrm{K}$ 时费米面上一种自旋取向的态密度。所以，BCS理论对弱耦合电-声子机制的超导体性质的描述是带有普适性的。但电子间互作用很强时，任一个电子的状态也取决于其他电子所处的瞬间状态，且BCS理论中的电-声子作用作为虚声子传递到另一作用电子时忽略了传递过程的时间推迟性，称推迟相互作用。再者，晶体中存在多种振动模式，电-声子耦合强度是频率 ω 的函数，且声子态密度也与 ω 有关。但在BCS理论中用平均 ω 代替则或多或少地存在误差。这些不足之处，由强耦合理论来进行研究(参见"强耦合超导体")。

在BCS理论基础上，戈尔柯夫(Gorkov)在温度接近 T_c 时，用格林函数方法将 Δ 与GL有序参量 ψ 联系起来而给出了GL方程，使微观

参数和 GL 唯象参数也联系起来，对 GL 唯象理论有了微观理论的理解。

电-声子机制 electron-phonon mechanism　见“BCS 理论”。

BCS 哈密顿 BCS Hamiltonian　见“BCS 理论”。

BCS 基态波函数 BCS ground state wave function　用波函数表示的 BCS 基态，又简称 BCS 基态，见“BCS 理论”。

BCS 基态能量 energy of BCS ground state　见“BCS 理论”。

超导能隙 superconduction energy gap　见“BCS 理论”。一些超导元素在 $T=0$K 时的能隙值见下表。

一些超导元素绝对零度时的能隙值

										Al 3.4 3.3	Si
Sc	Ti	V 16.0 3.4	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn 2.4 3.2	Ga 3.3 3.5	Ge
Y	Zr	Nb 30.5 3.80	Mo 2.7 3.4	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd 1.5 3.2	In 10.5 3.6	Sn (W) 11.5 3.5
La 19.0 3.7	Hf	Ta 14.0 3.60	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg 16.5 4.6	Tl 7.35 3.57	Pb 27.3 4.38

注：第一行数值为 $2\Delta(0)(10^{-4}\mathrm{eV})$，第二行数值为 $2\Delta(0)/kT_c$

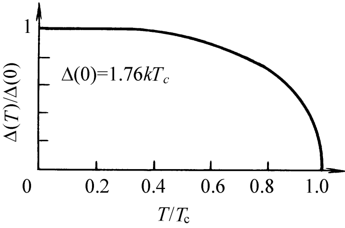
BCS 能隙方程 BCS energy gap equation　在通常情况下，BCS 理论定义对势

$$\Delta=-V\langle\Psi(\boldsymbol{r},\downarrow)\Psi(\boldsymbol{r},\uparrow)\rangle$$

有能隙存在时它代表超导能隙，Ψ 为场算符，在弱耦合条件下（$N(0)V\ll1$）给出的能隙方程为

$$1=N(0)V\int_0^{\hbar\omega}(\varepsilon^2+\Delta^2(T))^{-\frac{1}{2}}\cdot\mathrm{th}[(\varepsilon^2+\Delta^2(T))^{\frac{1}{2}}/2k_BT]\mathrm{d}\varepsilon$$

式中 $N(0)$为 $T=0$K 时费米面上一种自旋方向的态密度，V 为电子间净吸引势的平均强度，$\hbar$ 和 ω_D 分别是除以 2π 的普朗克常数和德拜频率，ε 是以费米面为零点的电子能量，k_B 为玻尔兹曼常数。数值计算的$\Delta(T)$与 T 的关系见下图，它与多数超导金属的实验结果符合甚好。



在 $T\to T_c$ 和 $T\to0$K 时的近似结果为：

$$\Delta(T)=\Delta(0)-(2\pi\Delta(0)k_BT)^{\frac{1}{2}}\cdot e^{-\Delta(0)/k_BT},$$
$(T\ll T_c)$

$$\Delta(\mathrm{T})=(1.74)\Delta(0)(1-T/T_c)^{\frac{1}{2}},$$
$(T_c-T)\ll T_c$

这里

$$\Delta(0)=2\hbar\omega_D\exp(-1/N(0)V)。$$

磁场中的能隙方程 energy gap equations in magnetic field 在有磁场存在时，能隙 Δ 是一个与位置 $\boldsymbol{r}$，磁场 $\boldsymbol{H}=\frac{1}{\mu_0}\nabla\times\boldsymbol{A}$ 和温度 T 有关的复函数。在 BCS 理论基础上，戈尔柯夫(Gorkov)用格林函数方法给出在 $T\to T_c$ 时的各向同性超导体的能隙方程。徐龙道，束正煌和王思慧在 $\Delta/\pi k_B T<1$ 的扩展温度区域给出了完整而具体的超导态自由能表式，并用电子有效质量近似给出了各向异性超导体的完整能隙方程：

$$\begin{aligned}&\sum_{\mu=1}^{3}\frac{1}{2m_\mu^*}(-i\hbar\nabla_\mu-e^*A_\mu)^2\Delta(\boldsymbol{r})\\&+\frac{8(\pi k_BT)^2N(0)}{7\zeta(3)n_s^*(0)}\left[\ln\frac{T}{T_c}\right]\Delta(\boldsymbol{r})\\&+\sum_{n=2}^{\infty}(-1)^n\frac{2^5n(2n-3)!!}{(2n)!!}\\&\cdot\frac{\zeta(2n-1)N(0)}{7\zeta(3)n_s^*(0)}\frac{1}{(\pi k_BT)^{2n-4}}\\&\times\left[1-\frac{1}{2^{2n-1}}\right]|\Delta(\boldsymbol{r})|^{2n-2}\Delta(\boldsymbol{r})\\&=0,\end{aligned}\qquad(1)$$

$$\begin{aligned}j_\mu&=\frac{1}{\mu_0}(\nabla\times\nabla\times\boldsymbol{A})\mu\\&=-\frac{7\zeta(3)n_s^*(0)}{8(\pi k_BT)^2}\\&\cdot\left\{\frac{i\hbar e^*}{2m_\mu^*}[\Delta^*(\boldsymbol{r})\nabla_\mu\Delta(\boldsymbol{r})\right.\\&-\Delta(\boldsymbol{r})\nabla_\mu\Delta^*(\boldsymbol{r})]\\&\left.+\frac{e^{*2}}{m_\mu^*}|\Delta(\boldsymbol{r})|^2A\mu\right\}\end{aligned}\qquad(2)$$

上二式是联立方程式，式中 $\zeta(2n-1)$ 是 Riemann Zeta 函数，$n_s^*(0)$ 和 e^* 是库珀电子对在 $T=0$K 时的数密度和电荷，j_μ 和 m_μ^* 是平行主轴 μ 的超导电流密度和库珀对有效质量，μ_0，k_B 和 $\hbar$ 分别是真空磁导率，玻尔兹曼常数和除以 2π 的普朗克常数，$N(0)$是 $T=0$K 时的态密度。当 $m_1^*=m_2^*=m_3^*$ 时就过渡到各向同性超导体的能隙方程，又若第一方程式只取至 $n=2$ 为止，并在 $\pi k_B T$ 中近似令 $T=T_c$，则联立方程又过渡到 $T\to T_c$ 时的各向同性的戈尔柯夫能隙方程的形式。方程(1)，(2)的各向异性体现在各向异性的 m_μ^* 上。

戈尔柯夫能隙方程 Gorkov energy gap equations 见“磁场中的能隙方程”。

BCS 临界温度 T_c 公式 formula of BCS critical temperature T_c 简称 BCS T_c 公式。在弱耦合条件下所给 T_c 公式为：

$$k_BT_c=(1.14)\hbar\omega_D\exp(-1/N(0)V)$$

由此知 $T_c\propto\omega_D$，ω_D 为德拜频率。但 $\omega_D\propto M^{-\frac{1}{2}}$，$M$ 为同位素原子质量。实验指出，$T_c\propto M^{-\alpha}$，对一般元素 $\alpha=1/2$。故上式给出了超导的同位素效应。实验结果又显示，当 $N(0)V\leqslant0.2$ 时，BCS 理论结果与实验的符合很好；$0.20<N(0)V<0.3$ 时有 1% 的误差；$N(0)V>0.3$ 时则误差增大较迅速。这里 $N(0)$和 V 分别是 $T=0$K 时费米面上一种自旋取向的态密度和电子间净的有效吸引相互作用势强度。所以 T_c 受弱耦合($N(0)V\ll1$)的限制，其最高 T_c 也受到限制，不能接近 ω_D 的最高值所对应的 T_c。BCS 理论机制估计的最高 T_c 一般约 30K 左右，对金属氢估计可达 252K。

准粒子态密度 density of single quasi-partical states 在相空间单位体积单位能量间隔中的状态数称态密度。在 BCS 理论中的准粒子态密度为：

$$N_s(E)=N(0)\frac{E}{\sqrt{E^2-\Delta^2}},(E>\Delta)$$

式中 E 为粒子的元激发能量，$N(0)$为正常相的态密度。上式对大多数超导金属与单电子隧道实验结果相符。

准粒子能量 energy of quasi-partical 见“BCS 理论”。又称元激发能量，简称激发能。

激发态 excited states 见“BCS 理论”。对单准粒子激发态可写成：

$$|1_K\rangle=\alpha_K^+|\psi\rangle_0$$

式中算符 α_K 为使哈密顿 $\mathscr{H}$ 对角化而引入并经反对易关系处理后给出的博戈留波夫(N. N. Bogolyubov)变换算符，用此变换可使计算方便且严谨。对实系数变换为：

$$\alpha_K=u_Kc_{K\uparrow}-v_Kc_{-K\downarrow}^+,$$

$$\alpha_K^+ = u_K c_{K\uparrow}^+ - v_K c_{-K\downarrow},$$

$$\alpha_{-K} = u_K c_{-K\downarrow} + v_K c_{K\uparrow}^+,$$

$$\alpha_{-K}^+ = u_K c_{-K\downarrow}^+ + v_K c_{K\uparrow}。$$

且对所有 $\boldsymbol{K}$ 有：

$$\alpha_K | \psi\rangle_0 = 0$$

而电子系统激发态为：

$$\alpha_{K_1}^+ \alpha_{K_2}^+ \cdots \alpha_{K_n}^+ | \psi >_0$$

这些态与基态和不同激发态都是相互正交的，且是归一化的，而对角化的哈密顿现在是：

$$\mathscr{H} = E_s + \sum_K E_K(\alpha_K^+\alpha_K + \alpha_{-K}^+\alpha_{-K}).$$

所给出的基态能量 E_s 和准粒子能量 E_K（或元激发能量）见“BCS 理论”。

博戈留波夫变换 Bogolyubov transformation 见“激发态”。

BCS 凝聚能 BCS condensation energy 一般将 $T=0$K 时的超导基态能量 $E_s(0)$ 与正常态费米球分布能量 $E_n(0)$ 之差称 BCS 凝聚能。由 BCS 理论给出：

$$E_s(0) - E_n(0) = - N(0)\Delta^2(0)/2$$

由此可知，$E_s(0) < E_n(0)$，能隙 $2\Delta(0)$ 的出现，系统将从正常态转入超导态而发生超导相变。

超声衰减 ultrasonic attenuation BCS 理论给出超导态和正常态两相超声衰减系数 α_s 和 α_n 之比为

$$\alpha_s/\alpha_n = 2[1 + \exp(\Delta(T)/k_B T)]^{-1}$$

由此实验上可测量能隙 Δ，并对铅，铝，锡等测出的 Δ 值与其他方法测得的结果基本相符，比值与温度 T 变化的实验曲线也与理论公式相符，也说明 BCS 理论对这些超导材料是正确的。

BCS 超导电性判据 BCS criterion for superconductivity BCS 将产生吸引的电-声子相互作用强过排斥的电子间屏蔽库仑相互作用作为超导电性的判据：

$$-V \equiv \langle -\frac{2|M_q|^2}{\hbar\omega_q} + \frac{4\pi e^2}{K^2}\rangle_{平均} < 0$$

式中 M_q 为电子发射或吸收一个波矢为 $\boldsymbol{q}$ 的声子的单散射中的电-声矩阵元，$\hbar\omega_q$ 为声子能量，$K^2 = q^2 + K_c^2$，K_c^{-1} 为库仑屏蔽长度，e 为电子电荷。

BCS 热力学临界磁场 BCS thermodynamic critical magnetic field 见“热力学临界磁场（H_c）”。

相变电子比热的 BCS 陡变 BCS discontinuity of electronic specific heat in phase transition 在无外磁场时当 $T = T_c$ 时的正常-超导相变是二级相变。按 BCS 理论，晶体中电子由正常电子到库珀电子对的转变中（或可逆过程）也体现出电子比热的陡变，是谓相变电子比热的 BCS 陡变，由如下理论结果表示：

$$\left[\frac{c_s - c_n}{c_n}\right]_{T_c} \approx 1.43$$

式中 c_s 和 c_n 分别是超导态和正常态的电子比热。上式比值是一个常数，多数纯金属超导体与实验结果相当符合。

BCS 相干长度 BCS coherence length 此长度相当于两两电子结成库珀对的每对电子有一相关（相干）空间平均范围，称 BCS 相干长度。BCS 参照皮帕德（Pippard）的纯超导体方程作对比并与微观量联系起来定出的 BCS 相干长度 ξ_0 为：

$$\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{\pi\Delta(0)} = (0.18)\frac{\hbar v_F}{k_B T_c}$$

这里 $\hbar$ 和 v_F 分别是除以 2π 的普朗克常数和电子费米速度，$\Delta(0)$ 为 $T=0$K 时的能隙，k_B 为玻尔兹曼常数。

BCS 电流方程 BCS current equation 对纯超导体，BCS 理论给出的具有迈斯纳效应的超导电流方程为：

$$\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r}) = -\frac{3}{4\pi\xi_0\lambda_L^2\mu_0} \cdot \int \frac{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}'))J(R,T)}{R^4}\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

这是超电流 $\boldsymbol{j}_s(\boldsymbol{r})$ 和矢势 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')$ 之间的非定域关系。式中 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$，$\xi_0$ 和 λ_L 分别是 BCS 相干长度和伦敦穿透深度，μ_0 是真空磁导率，$\boldsymbol{j}_s$ 方程与皮帕德方程的差别是量程函数 $J(R,T)$ 代替了指数因子 e^{-R/ξ_0}。BCS 理论要求

$$\int_0^\infty J(R,T)\mathrm{d}R = \xi_0,$$

这与 $\int_0^\infty e^{-R/\xi_0}\mathrm{d}R = \xi_0$ 的积分值是相同的。实

际上 $J(R,0)$与指数因子很接近，$J(R,T_c)$与指数因子误差也是较小。由此，BCS 理论给予了皮帕德理论微观解释。对于非纯超导体，则 $J(R,T)$的积分值用 ξ 代替 ξ_0，且 $\xi^{-1}=\xi_0^{-1}+l^{-1}$，这里 l 是电子平均自由程，ξ 又与皮帕德理论中的 ξ_p 相一致。由此，在伦敦极限下给出伦敦方程，等等，使宏观理论与 BCS 微观理论又联系起来，加深了对宏观现象的微观理解。

BCS 穿透深度 BCS penetration depth 对纯超导体，由 BCS 电流方程，在伦敦极限下($\xi_0 \ll \lambda$ 或 $l \ll \xi_0$)的穿透深度与伦敦穿透深度 $\lambda_L(T)$相符。对非纯超导体(含杂质)，在伦敦极限下为

$$\lambda(T)=\lambda_L(T)(1+\xi_0/l)^{\frac{1}{2}}$$

一般地，$\lambda_L(T)$由经验公式表示其与温度 T 的关系(见“伦敦穿透深度”)。在皮帕德极限下($\xi_0 \gg \lambda$ 或 $\xi_0 \ll l$)，$\xi_p=\xi_0$，则给出为

$$\lambda(T)=\frac{8}{9}\lambda_L(T)\left[\frac{\sqrt{3}\,\xi_0}{2\pi\lambda_L(T)}\right]^{\frac{1}{3}}$$

弱耦合超导体 weak-coupling superconductors 在电-声子机制的 BCS 理论中，满足条件 $N(0)V \ll 1$ 的超导体性质的称弱耦合超导体(见“BCS 理论”)，它们在 0K 温度时的能隙 $2\Delta(0)$与 $k_B T_c$ 的比值

$$\frac{2\Delta(0)}{k_B T_c}\approx 3.53$$

是一个普适常数，与多数超导元素实验结果基本符合和符合甚好。

推迟相互作用 retarded interaction 见“BCS 理论”。

强耦合超导体 strong-coupling superconductors BCS 的 T_c 公式中当 $N(0)V>0.30$ 时误差增大较迅速。一般地，定义 $\lambda=N(0)V>1$ 的超导体为强耦合超导体，即体现着电子-声子的互作用强度是强的，按 BCS 理论对弱耦合超导体给出 $2\Delta(0)/k_B T_c \approx 3.53$，但如对 Pb 和 Hg 则并不符合，它们分别为 4.3 和 4.6，主要它们属于强耦合超导体。

仍以电-声子机制为基础的强耦合理论考虑了 BCS 理论中忽略的声子推迟效应和应与频率 ω 有关的声子态密度 $F(\omega)$，以及电声子耦合强度作为 ω 的函数 $a^2(\omega)$，并显现出屏蔽库仑排斥作用和计及电子自能修正等。电子自能是指电子-电子，电子-声子，或电子和其他元激发间的相互作用能量与自由电子气中电子能量之差，可由多体理论计算。对 $\lambda<1.5$ 时的强耦合超导体，最常用的 T_c 公式是麦克米兰(McMillan) T_c 公式：

$$T_c=\frac{\theta_D}{1.45}\cdot\exp\left[-\frac{(1.04)(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+(0.62)\lambda)}\right]$$

式中 λ 与 $N(0)V$ 相当，但现在是：

$$\lambda=2\int_0^{\infty}\frac{a^2(\omega)F(\omega)}{\omega}\mathrm{d}\omega$$

θ_D 为德拜温度，而

$$\mu^*=\mu/[1+\mu\ln(\varepsilon_F/k_B\theta_c)]$$

$\mu=N(0)V_c$，V_c 为平均屏蔽库仑势，ε_F 为费米能，θ_c 是最高德拜温度。μ^* 称库仑赝势，是电子间屏蔽库仑作用的有效势。在 λ 比 1.5 更大时，T_c 公式为：

$$T_c=(0.15)[\lambda\langle a^2F/\omega\rangle]^{\frac{1}{2}}$$

$\langle\cdots\rangle$表示平均。强耦合理论对 Pb 和 Hg 等在比值 $2\Delta(0)/k_B T_c$ 和相变比热陡变等上与实验结果相一致。在弱耦合极限下回到 BCS 的 T_c 公式时为：

$$T_c=\theta_D\exp[-1/(\lambda-\mu^*)]$$

一般地，代表库仑排斥的 μ^* 在0.1～0.2之间。上式表明，对 $\lambda>\mu^*$ 的金属才是超导体，这也可作为检验是否是超导体的理论判据。例如对铜的理论估计 $\lambda-\mu^*=-0.16$，所以电子间库仑排斥作用大于电-声子产生的吸引作用，虽然铜是良导体，但不可能是超导体。对锡和铅，则 $\lambda-\mu^*$ 分别是 0.27 和 0.42，它们均是超导体。

电-声子机制这种强耦合理论估计的 T_c 能达到的最高限度为 30K～40K。

超导电性的强耦合理论 strong-coupling theory of superconductivity 见“强耦合超导体”。

电子自能 self energy of electrons 见“强耦合超导体”。

麦克米兰 T_c 公式 McMillan T_c formula 见"强耦合超导体"。

库仑赝势 Coulomb pseudopotential 见"强耦合超导体"。

无能隙超导电性 gapless super-conductivity 在某些情况下,电子能谱中能隙为零时仍具有超导电性,称无能隙超导电性。简单的例子,例如载电流超导体,此时给出的激发能量是:$E_K = E_K^0 + p_K \cdot \boldsymbol{v}_s$, $\boldsymbol{v}_s$ 为超导电流速度,p_K 为电子动量,而 $E_K^0 = (\varepsilon_K^2 + |\Delta|^2)^{\frac{1}{2}}$ 为零电流时的激发能(见"BCS 理论"),这里 ε_K 是以费米面为零点的电子能量。对无载电流超导体,能隙 Δ 消失时处在费米面上电子最小激发能 $E_{\min}^0 = 0$。对载电流超导体 $E_{\min} = \Delta - p_F v_s$,这里 Δ 为 BCS 对势(见"BCS 能隙方程")。在仔细求自洽解时得出,当 v_s 略大于 Δ / p_F 的一个小区域中,虽然 $E_{\min} = 0$ 且在实验上能隙消失,但对势 $\Delta \neq 0$。所以这里的对势并不与激发谱中的能隙相同,超导电流依然存在,其能谱与正常态能谱在定性上无差别。无能隙超导电性往往发生在超导电性将被破坏时在 Δ 很小的区域范围。例如第二类超导体在接近 H_{c_2} 时的涡旋态,超导小样品、表面超导电性和含磁性杂质的超导体在临界杂质浓度下,在一个浓度范围内也可呈现无能隙超导电性。

常规超导体 normal superconductors 指的特别是 80 年代以前传统研究的超导体,机理上主要用 BCS 理论和强耦合理论来解释,一般局限于电子 S 波配对,临界温度都较低。

非常规超导体 non-normal superconductors 指不同于传统研究的超导体,机理研究有新发展和新探索。如低载流子密度超导体(包括层状结构超导体),有机超导体,超晶格超导体,非晶态超导体,磁性超导体等。在机理研究上除进深的电-声子机制外,有激子机制,双极化子,重费米子,等离子体激元,共振价键,费米液体,自旋涨落,自旋口袋模型等等,在电子配对上(包括空穴型)仍有 S 波配对外,有 P 波配对,D 波配对等选择。

高温(T_c)超导体 high-temperature(T_c) superconductors 通常指接近和高于 BCS 理论估计可能达到的最高 T_c 极限(约 30K)的超导体(对金属氢等 T_c 的估计例外)。1986 年,J. G. Bednerz 和 K. A. Muller 发现并指出 Ba-La-Cu-O 系氧化物超导体的 T_c 可能达 35K,当即在国际上掀起了对高临界温度 T_c 超导体研究的热潮。之后陆续发现了一系列高 T_c 超导体,主要是氧化物超导体,见如下页分类表(1997 年《物理学进展》第 17 卷第 4 期)。他们二人由于此突破性工作获得了 1987 年度的物理学诺贝尔奖。参见下页表。

氧化物超导体 oxide superconductors 即含氧的化合物超导体,它们大多数具有派生的层状类钙钛矿型结构,具有单层或多层的二维 CuO_2 平面,故也有称层状结构氧化物超导体,而一般是以铜为主要元素的多元结构氧化物。例如 La 系,Y 系,Bi 系,Tl 系,Hg 系均含有铜元素,而所列这些系的超导体的电荷载流子为空穴,称"空穴型超导体"。对 Nd 系,如钕铈铜氧(NdCeCuO)体系(这里 Nd 可为一些镧系元素代替),其电荷载流子为电子,称"电子型超导体"。也有非含铜超导体的,如(BaKBiO)体系等。这些氧化物体系的超导体的临界温度 T_c 见"高温(T_c)超导体"。这类超导体的含氧量和分布对其结构和超导电性都有较大的影响,大多数氧化物超导体的电子结构具有铜氧平面 CO_2 构成的导电载流子层和调节电荷的载流子库,它们的 T_c 均较高,相干长度比常规超导体的要小得多,属第二类超导体,且显示出强烈的各向异性性质。

层状结构氧化物超导体 oxide superconductors in layered structure 见"氧化物超导体"。

电子型超导体 electron-type superconductor 电荷载流子为电子的超导体称电子型超导体,或 n 型超导体。按 BCS 理论,此时结成配对电子是库珀对。

高 T_c 氧化物超导体分类表

			T_c/K
La 系	$(La_{1-x}M_x)_2CuO_4$	(x=0.08)	
	M=Ba		30
	Sr,Ca		20,40
	Na		40
Y 系	$LnBa_2Cu_3O_7$	(123)	90
	Ln=Y,La,Nd,Sm,Eu,Gd,		
	Dy,Ho,Er,Tm,Yb,Lu		
	$Y_2Ba_4Cu_8O$		
Bi 系	$BiSr_2CuO_6$	(2201)	7～12
	$Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$	(2212)	80
	$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_3O_{10}$	(2223)	110
	$Bi_2Sr_2Ca_2Cu_4O_{12}$	(2234)	90
Tl 系	$Tl_2O_{2(n-1)}Ca_nCuO_2$		
	$Tl_2Ba_2CuO_6$	(2201)	2～90
	$Tl_2Ba_2CaCu_2O_8$	(2212)	105
	$Tl_2Ba_2Ca_2Cu_3O_{10}$	(2223)	125
	$Tl_2O_2BaO_{(n-1)}CaOCuO_2$		
	$TlBa_2CaCu_2O_7$		70～80
	$TlBa_2Ca_2Cu_3O_9$		110～116
	$TlBa_2Ca_3Cu_4O_{11}$		120
	$TlBa_2Ca_4Cu_5O_{13}$		<120
Hg 系	$HgBa_2CuO_{4+x}$	(1201)	94
	$HgBa_2Ca_2Cu_3O_{8+x}$	(1223)	135
	(high pressure)		155～160
无限层结构	$MCuO_{2+x}$	(M=Ca,Sr,Ba)(p-type)	110
Infinite Layer		(M=Nd,CE,Lu)(n-type)	40
其他	$Nd_{0.8}Sr_{0.2}Ce_{0.2})CuO_2$		27
	$(Nd_{1-x}Ce_x)_2CuO_4$	(x=0.07)	25
	$(Ba_{1-x}M_x)BiO_3$	(x=0.4)	30
	M=K,Rb		

空穴型超导体 hole-type superconductor 电荷载流子为空穴的超导体称空穴型超导体,或 p 型超导体,由 BCS 理论推知,此时是结成空穴配对的库珀对。

n 型超导体 n-type superconductor 即"电子型超导体"。

p 型超导体 p-type superconductor 即"空穴型超导体"。

元素替代效应 effects of atomic substitutions 元素替代或掺杂效应,例如对氧化物超导体的某种化学元素为其他某种元素部分替代或由另外元素来替代后对超导电性的影响程度称元素替代效应。由于氧化物超导体的 CuO_2 平面载流子层对产生高温超导电性起有主要作用,所以元素替代或掺杂效应一般地有三种情况:(1)发生在非 CuO_2 面的元素替代对 CuO_2 面的性质基本无影响或无影响;(2)发生在非 CuO_2 面的元素替代对 CuO_2 面性质产生

影响;(3)发生在 CuO_2 面上的元素替代对超导电性质的影响程度。例如对 Y 系氧化物超导体 $YBa_2Cu_3O_7$(见"高温(T_c)超导体"的分类表),若用 La 或 Nd 或 Sm 等替代 Y 元素,它们对 CuO_2 平面载流层性质均可说无影响,它们的 $T_c \simeq 90K$ 均一样,这是属于上述(1)的情形。对镧系氧化物超导体 $(La_{1-x}Ba_x)_2CuO_4$,这里 $x=0.08$ 时对应的 $T_c=30K$。但若用 Sr 或 Ca 替代 Ba 元素(x 仍是 0.08),CuO_2 平面载流层的性质就有变化,此时 T_c 分别对应为 20K 和 40K,这是上述(2)的情形。上述第(3)种情形,例如对镧系的 $La_{1.85}Sr_{0.15}Cu_{1-x}Ni_xO_{4\pm y}$,这里用 Ni 部分地替代 Cu。实验显示,少量的掺杂 Ni 即可引起 T_c 的急剧下降,且随着 x 的逐渐增加,其导电行为从金属性质变为半导体性质。

各向同性超导体 isotropic superconductor 超导电性质是各向同性的超导体称各向同性超导体,在宏微观性质上,如临界磁场(包括第一、二、三临界场),临界电流,穿透深度,相干长度,态密度,能隙等均与取向无关。

各向异性超导体 anisotropic superconductor 超导电性质是各向异性的超导体,且只要其中有一个取向性质与其他取向的性质有异也属这类超导体。层状结构氧化物超导体是各向异性超导体,它们的某些宏微观物理性质与取向有关,例如沿晶轴 c 方向和 a b 面方向的相干长度,磁场穿透深度等均有异。

有效质量近似 effective mass approximation 固体中电子在晶格势场或再附加有外力作用场中的运动,在用薛定谔(Schrödinger)方程研究电子能量 $E(\boldsymbol{K})$(能带)时,与牛顿(Newton)力学对比定义的电子有效质量 m^* 为

$$\boldsymbol{m}_{ij}^* = \hbar^2 \Big/ \left[\frac{\partial^2 E(\boldsymbol{K})}{\partial K_i \partial K_j} \right],$$

$$(i, j = 1, 2, 3)$$

它是二阶张量形式,这里 $\boldsymbol{K}$ 是波矢。在变换到主轴时为:$m_i^* = \hbar^2/[\partial^2 E(\boldsymbol{K})/\partial K_i^2]$,$\hbar$ 为除以 2π 的普朗克常数。m^* 中实际包含了晶格场的作用,且与 $\boldsymbol{K}$ 有关,所以与自由电子质量 m 有区别。但电子能谱较复杂时,理论上要精确定出 m^* 值是困难的,因此对多体问题一般也是用近似方法去研究。这种准经典的 m^* 可与经典牛顿力学比照,可使问题相对简化,将 m^* 可看做参量对待,可与实验相对应来确定其值,但也仍是一种近似。所以一般称有效质量近似。这种近似对有外力场作用下和对各向异性晶体性质的研究可使问题简化。例如对各向异性超导体,利用这种近似,体现在各向异性性质上,用各向异性有效质量近似可方便地建立各向异性 GL 方程。

各向异性 GL 方程 anisotropic GL equations 在低于临界温度 T_c 附近,对应于取主轴方向的各向异性 GL 方程为:

$$\sum_{\mu=1}^{3} \frac{1}{2m_\mu^*}(-i\hbar\nabla_\mu - e^* A_\mu)^2 \psi + \alpha(T)\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0, \quad (1)$$

$$j_\mu = -\frac{i\hbar e^*}{2m_\mu^*}(\psi^* \nabla_\mu \psi - \psi \nabla_\mu \psi^*) - \frac{(e^*)^2}{m_\mu^*}|\psi|^2 A_\mu = \frac{1}{\mu_0}(\nabla \times \nabla \times \boldsymbol{A})_\mu \quad (2)$$

式(1)和(2)是非线性联立方程式,它们的各向异性性质体现在用有效质量近似的不同的各向异性有效质量 m_μ^*($\mu=1,2,3$)上。按 BCS 理论框架,m_μ^* 表示沿主轴 μ 方向的库珀电子对的有效质量,e^* 是库珀对的电荷,$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{j}$ 分别为矢势和超导电流密度,$\hbar$ 是除以 2π 的普朗克常数,μ_0 是真空磁导率,α 和 β 是 GL 自由能展式系数,因在 $T \to T_c$ 附近,$\alpha(T) = \alpha_0(1-T/T_c)$,$\alpha_0<0$ 和 β 均由实验来确定。各向异性超导体的宏观性质,包括宏观量子性质均可由各向异性 GL 方程来研究。若 $m_1^* = m_2^* = m_3^*$,则方程(1)和(2)过渡到各向同性超导体的 GL 方程,此时 $m^*=2m$,m 为电子质量,$e^*=2e$,e 为电子电荷量。

在 BCS 理论基础上,徐龙道、束正煌和王思慧用有效质量近似,在温区 $\Delta(T,H)/\pi k < T \leqslant T_c(H)$ 内推广到各向异性理论并给出了完整而具体的各向异性 GL 方程(Δ 为能隙,H 为磁场强度,k 是玻尔兹曼常数):

$$\sum_{\mu=1}^{3} \frac{1}{2m_\mu^*}(-i\hbar\nabla_\mu - e^* A_\mu)^2 \psi$$

$$+\alpha\psi+\sum_{n=2}^{\infty}\beta_n|\psi|^{2n-2}\psi=0,\tag{3}$$

$$j_\mu=-\frac{i\hbar e^*}{2m_\mu^*}(\psi^*\nabla_\mu\psi-\psi\nabla_\mu\psi^*)-\frac{(e^*)^2}{m_\mu^*}|\psi|^2A_\mu\tag{4}$$

其中

$$\alpha=\frac{8(\pi kT)^2N(0)}{7\zeta(3)n_s^*(0)}\ln\frac{T}{T_c}\tag{5}$$

$$\beta_n=(-1)^n\frac{2^{3n+2}n(2n-3)!!}{(2n)!!}\cdot\frac{N(0)\zeta(2n-1)}{[7\zeta(3)n_s^*(0)]^n}(1-\frac{1}{2^{2n-1}})(\pi kT)^2,\quad(n=2,3,4,\cdots)\tag{6}$$

这里将 GL 理论中需由实验确定的宏观系数 α 和 β_n 同微观量 $N(0)$和 $n_s^*(0)$表示了出来,且给出了与 T 的具体函数关系。其中 $N(0)$为 $T=0$K 的态密度,$n_s^*(0)$是 $T=0$K 时库珀电子对浓度,$\zeta(2n-1)$是 Riemann Zeta 函数,而这里的 β_2 对应于方程(1)中的 β。当 $m_1^*=m_2^*=m_3^*$,则过渡到各向同性的完整而具体的 GL 方程。若忽略 $n=3,4,\cdots$的项,即是通常所称的各向异性或同性的 GL 方程。

各向异性相干长度 anisotropic coherence length 在主轴坐标系中,按各向异性 GL 理论,此时相干长度定义为

$$\xi^2(T)=\hbar^2/2m^*|\alpha|$$

这里 $m^*=(m_1^*m_2^*m_3^*)^{\frac{1}{3}}$,1,2,3 对应于 x,y,z 方向的三个分量。若磁场沿 z-轴方向,例如对层状结构氧化物超导体即沿晶轴 c 的方向,则在 $m_1^*\simeq m_2^*=m_{ab}^*$时,对应于 ab 晶面的 $\xi_{ab}(T)=\hbar/(2m_{ab}^*|\alpha(T)|)^{\frac{1}{2}}$,也可写成 $\xi_{ab}^2=\phi_0/2\pi\mu_0H_{c_2}^{/\!/}$,这里 ϕ_0 是磁通量子,$H_{c_2}^{/\!/}$为平行于 c 轴时的第二临界磁场,μ_0 为真空磁导率,而 $\xi_c=\xi_{ab}(m_{ab}^*/m_c^*)^{\frac{1}{2}}$。在 T_c 附近,它们与温度 T 的关系为

$$\xi_{ab}(T)=\xi_{ab}(0)(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\xi_c(T)=\xi_c(0)(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}}$$

各向异性穿透深度 anisotropic penetration depth 在弱磁场下,由各向异性 GL 电流方程可给出各向异性磁场穿透深度为

$$\lambda_\mu^2(T)=m_\mu^*/\mu_0(e^*)^2|\psi|^2$$

这里 $\mu=1,2,3$ 为三个主轴分量符号,$|\psi|^2=n_s^*(T)$为库珀电子对数密度。对层状结构氧化物超导体也可用如下式子表示:

$$\lambda_{ab}^2=\phi_0K_{ab}/2\sqrt{2}\pi\mu_0H_c,$$

$$\lambda_c=\lambda_{ab}(m_c^*/m_{ab}^*)^{\frac{1}{2}}$$

H_c 为热力学临界磁场,K_{ab}为 ab 面 GL 参量。在 T_c 附近,它们与温度 T 的关系为

$$\lambda_{ab}(T)=\lambda_{ab}(0)(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}},$$

$$\lambda_c(T)=\lambda_c(0)(1-T/T_c)^{-\frac{1}{2}}$$

各向异性 GL 参量 K_μ Anisotropic GL parameters K_μ 在主轴坐标系,各向异性 GL 参量定义为

$$K_\mu=\lambda_\mu/\xi_\mu,\mu=1,2,3$$

这里 λ_μ 和 ξ_μ 分别为各向异性 μ 分量的穿透深度和相干长度,K_μ 又可写成

$$K_\mu=\frac{\sqrt{2}m_\mu^*}{e^*\hbar}\sqrt{\frac{\beta}{\mu_0}}$$

它的各向异性也是由各向异性库珀对电子有效质量 m_μ^* 来呈现,这里 β 是 GL 自由能密度展式系数之一。对层状结构氧化物超导体,一般地 $\lambda_\mu\gg\xi_\mu$,而 $K_\mu>1/\sqrt{2}$的超导体属第二类超导体,所以由于 $K_\mu\gg1$ 的氧化物超导体称大 K 或极端第二类超导体,且由于 ab 面的近各向同性,$m_a\simeq m_b$,所以 $K_a\simeq K_b=K_{ab}$。

各向异性第一临界磁场 anisotropic first critical magnetic field 在主轴坐标系中,在 GL 参量 $K_\mu\gg1(\mu=1,2,3)$近似下,设磁场平行于主轴 $z(\mu=3)$,由各向异性 GL 方程给出的各向异性第一临界磁场近似为

$$H_{c_1}^{/\!/}=H_c(T)\ln\sqrt{K_1K_2}/\sqrt{2K_1K_2}$$

对层状结构氧化物超导体,由于 $K_a\simeq K_b=K_{ab}$,在大 K_μ 近似下有

$$H_{c_1}^{/\!/}(T)=H_c(T)\ln K_{ab}/\sqrt{2}K_{ab}$$

$$H_{c_1}^{\perp}(T)=H_c(T)\ln(K_{ab}K_c)/2(2K_{ab}K_c)^{\frac{1}{2}}$$

在接近临界温度 T_c 时,热力学临界磁场 H_c

(T)为

$$H_c(T)=H_c(0)(1-T/T_c)$$

这里 K_μ 是各向异性 GL 参量，$H_{c_1}^{/\!/}$和 $H_{c_1}^{\perp}$分别为磁场与 Z(或 c 轴)轴平行和垂直时的第一临界磁场，其物理性质含义参见“第一临界磁场”。

各向异性第二临界磁场 anisotropic second critical magnetic field 在主轴坐标系中，设磁场平行于主轴 Z，由各向异性 GL 方程给出的各向异性第二临界磁场为

$$\boldsymbol{H}_{c_2}^{/\!/}(T)=\frac{2\,|\,\alpha(T)\,|\,(m_1^* m_2^*)^{\frac{1}{2}}}{\mu_0\hbar e^*}=\sqrt{2K_1K_2}\,H_c(T)$$

这里 $\alpha(T)$为 GL 自由能密度展式系数，m_μ^* 和 $K_\mu(\mu=1,2,3)$分别为库珀对有效质量和 GL 参量的 μ 分量，e^*为库珀电子对电荷量，$\hbar$ 是除以 2π 的普朗克常数，μ_0 是真空磁导率，$H_c(T)$为热力学临界磁场。对层状结构氧化物超导体，GL 参量 $K_a\simeq K_b=K_{ab}$，并有

$$\boldsymbol{H}_{c_2}^{/\!/}(T)=\sqrt{2}\,K_{ab}H_c(T),$$

$$\boldsymbol{H}_{c_2}^{\perp}(T)=(2K_{ab}K_c)^{\frac{1}{2}}H_c(T)$$

$\boldsymbol{H}_{c_2}^{/\!/}$和 $H_{c_2}^{\perp}$分别为磁场与主轴 Z(或晶轴 C)平行和垂直时的第二临界磁场，其物理性质含义参见“第二临界磁场”。

各向异性第三临界磁场 anisotropic third critical magnetic field 在主轴坐标系中，设磁场平行于主轴 Z，对有表面超导电性存在的各向异性超导样品，由各向异性 GL 方程给出的各向异性第三临界磁场为

$$H_{c_3}^{/\!/}(T)=(1.69)H_{c_2}^{/\!/}(T)$$

这里 $H_{c_2}^{/\!/}(T)$为磁场平行主轴 Z 时样品的第二临界磁场(见“各向异性第二临界磁场”)。若有效质量 $m_1^*=m_2^*$，则过渡到 x-y 面是各向同性的情形。

超导电子学 electronics of superconductivity 1962 年约瑟夫森(Josephson)从理论上提出了凝聚的库珀电子对在零电压下也有隧道效应，并为实验所证实。之后，他对两超导层中间夹绝缘层，即 S-I-S 隧道结的计算又给出隧道电流 j 为：

$$j=j_0(V)\sin\Delta\phi+[\alpha_0(V)+\alpha_1(V)\cos\Delta\phi]V$$

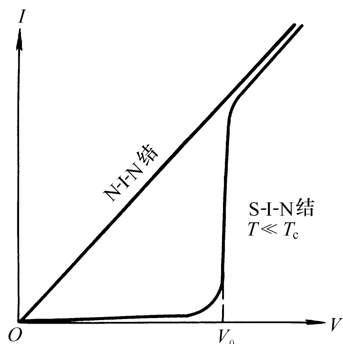
式中右边第一项即使在零电压($V=0$)时也存在，通常称之谓约瑟夫森电流，它与隧道结二边的超导电子对波函数的相位差 $\Delta\phi$ 关系密切，这种特征显示着与通常的准粒子隧道效应不同，与此相联系的超电流隧道效应相关的现象一起称约瑟夫森隧道效应，也可包括直流约瑟夫森效应和交流约瑟夫森效应等从广义上的理解。上式右边第二项为准粒子隧道电流，第三项是与 $\Delta\phi$ 相关的准粒子隧道电流，它们只有在电压 $V\neq0$ 时才伴随显现。伴随着约瑟夫森隧道效应开展的一系列理论、实验和应用的研究，特别是一系列超导量子器件(约瑟夫森器件)的诞生并进入电子学领域，形成了一个新的低温电子学重要领域，即超导电子学。例如超导结可用于制作高频振荡放大、检波和混频等器件。贾埃弗(I. Giaever)用超导结的单电子隧道效应可测量超导能隙和态密度以及它们与温度的关系等。约瑟夫森超导隧道结制成的超导量子干涉器(SQUID)可用于灵敏度高达 $10^{-11}\mathrm{GHz}^{-1}$的磁强计和可测量至 $10^{-15}\mathrm{VHz}^{-\frac{1}{2}}$的电压计等，并可作为引力波探测和对生物磁性的研究等，如对人体代替作心电图的心磁图测检。约瑟夫森器件用作超导计算机元件也已取得可喜的进展。

隧道效应 tunnel effect 两块导体间夹有绝缘层(N-I-N)后(也可是空间)，在小电压下，电子动能虽小于绝缘层势垒的高度，但仍有概率隧穿势垒而有隧道电流，这现象称隧道效应，也可包括伴随的有关效应在内。电子隧穿绝缘层势垒的概率随隧道电流随绝缘层厚度的增大而指数下降，也与绝缘材料的性质有关(如势垒的高低)。有超导体参与的隧道效应，如超导体(S)与正常金属(N)中间夹一绝缘介质层(I)的系统称 S-I-N 隧道结，又如 S_1-I-S_2 隧道结，S-I-S 和 S-N-S 结等，这些简称为隧道结，也包括 N-I-N 在内。它们的隧道效应各有其相应的性质。对 S-I-S 结，通常绝缘层厚度在几百埃至几十埃时发生的是正常电子隧道效应，在 10 埃左右可呈现有超导电子对的隧

道效应。以绝缘结层区的形状又可分为矩形结和圆柱形等结。

隧道结 tunnel junction 见“隧道效应”。

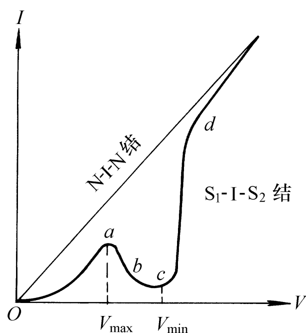
S-I-N 隧道结 S-I-N tunnel junction 是指超导体(S)和正常金属(N)间夹有绝缘介质层(I)组成的隧道结。在结两侧加上电压 V 时的隧道电流 I 与 V 的 I-V 特性曲线示意图如下。



当 $0<eV<\Delta(T)$ 时几乎不无隧道电流,这里 $\Delta(T)$ 为超导能隙。当 $|V| \geqslant V_0=|\Delta(T)/e|$ 时,超导电子对被拆散激发为二个准粒子而隧穿绝缘层势垒形成隧道电流。拆散电子对所需最小能量为 $2\Delta(T)$,一个电子平均需能隙为 $\Delta(T)$ 的能量。由于激发为准粒子带有集体效应,故在 $|V| \geqslant V_0$ 时电流很快上升,而接近 N-I-N 的隧道电流。这种不同于单个正常电子隧道 N-I-N 的单粒子隧道称双粒子隧道,类似现象也发生在 S-I-S 和 S_1-I-S_2 隧道结。这些隧道结若在 S 一侧同时有多个超导电子对被拆散激发而同时隧穿到另一侧(需遵从泡利原理),这种隧道过程称多粒子隧道,但这种概率是很小的。利用这些隧道结可测定超导体的能隙。

S_1-I-S_2 隧道结 S_1-I-S_2 tunnel junction 是指两种不同超导体 S_1 和 S_2 间夹有绝缘介质层 I 的隧道结,其 I-V 特性曲线见右上图。

由于 S_1 和 S_2 不同,$\Delta_1(T)$ 和 $\Delta_2(T)$ 也不等。图中 $V_{max}=|\Delta_2-\Delta_1|/e$, $V_{min}=(\Delta_1+\Delta_2)/e$,在这两者之间是负阻区,而 $V \geqslant V_{min}$ 时,隧道电流迅速上升并接近 N-I-N 的情景。由负电阻特性和电流的极大和极小可测定 Δ_1 和 Δ_2。但在 $T=0$K 时,因没有热激发准粒子,所以只有当 $V \geqslant (\Delta_1+\Delta_2)/e$ 时才发生准粒子隧道效应。对 S-I-S 隧道结,$\Delta_1=\Delta_2$,其单电子隧道效应的 I-V 特性曲线类同于 S-I-N 的 I-V 曲线形状。



单电子隧道效应 single electron tunnel effect 通常指 N-I-N 隧道结的隧道效应,因正常金属中自由电子可看做以独立的单电子形式隧穿绝缘层势垒。对有超导体参与的隧道结,在有热激发下有少量电子处于能隙以上的能态上,这些电子的隧道效应也视为单电子隧道效应,也可包括用其他方式激发的准粒子隧道效应,如光子、高能声子等的注入来拆散电子对,产生正常电子隧道效应。

双粒子隧道 two-particle tunneling 参见“S-I-N 隧道结”。

多粒子隧道 multipartical tunneling 参见“S-I-N 隧道结”。

弱连接 weak link 与夹有绝缘层势垒的超导隧道结有异,两块超导体直接局部接触联接,两侧超导体可处于弱耦合,也存在约瑟夫森效应。这种连接称弱连接或总体称弱连结。如两超导体之间的点接触,在超导体横截面上的制作一短的缩颈,焊滴结等,在结构形式设计上是多样化的,乃至包括 S-N-S 结也制成是弱连结。

点接触结 point contact junction 简便的方式是将超导体一削尖的端点(约 0.1μm 端径)施压在另一超导体小面上而接触成点接触结,

它是一种弱连接。由于压力可调节,就可选择最好所需最适宜接触性能。点接触结可用于制作磁强计和微波接收与发射等装置。

超导桥 superconducting bridges　将蒸发在金属或玻璃底片的超导膜上,用光刻技术将膜雕切,其间只留下 μm 量级长宽的部分相连形成搭桥式的结称超导桥。由于其临界电流与温度变化关系大,所以可蒸发叠加一薄层金属膜产生邻近效应,虽超导膜的超导性被弱化,但桥区尺度可增大,且弱性又取决于超导和正常层的厚度,故其性能变化范围可扩大。这种超导桥又称邻近效应桥。

约瑟夫森隧道效应 Josephson tunnel effect　参见“超导电子学”。

直流约瑟夫森效应 D. C.(direct current) Josephson effect　在零电压下,超导电子对隧穿约瑟夫森结(S-I-S)的绝缘层势垒所通过的超导直流电流现象称直流约瑟夫森效应。通常它能承受的最大直流电流 I_c 在几十微安到几十毫安范围,且随外磁场 H 的改变很敏感,其 I_c-H 关系与光学中单缝的夫琅禾费(Faunhoffer)衍射图像相似,例如 H 平行于矩形隧道结平面时就是这样,且这时 I_c 两邻近最小值间隔设为 H_0,则它与结横截面积 A 的乘积 H_0A 等于一个磁通量子 ϕ_0。对弱连结也同样呈现有直流约瑟夫森效应。

交流约瑟夫森效应 A. C.(alternation current) Josephson effect　约瑟夫森结两端加上电压 V 有显示时(超过未显示时,即 $V=0$ 时的最大超电流 I_c),结区出现辐射频率 ν 与 V 成正比的正弦超电流:$\nu=2eV/h$,e 为电子电荷量,h 为普朗克常数。若结区再受微波辐射,则在 I-V 特性曲线上,在某些分立的常电压下,直流电流会突然增大,出现被感应的一系列常电压–电流阶梯,台阶处 V_n 与相应辐照微波频率 ν 的关系为:$V_n=nh\nu/2e(n=0,1,2,\cdots)$。邻近电流阶梯间的电压差是等距离的,这种电流阶梯称微波感应阶梯,这是吸收电磁波所致,与上面所述辐射电磁波成为逆效应,这些现象统称为交流约瑟夫森效应,可用能量守恒来理解。对弱连结也呈现有交流约瑟夫森效应。用此效应测定的物理常数 $h/2e$ 是最精确的,由于电流阶梯处 V 不变,已公认可监督电动势基准。

约瑟夫森方程 Josephson equation　由于约瑟夫森效应与结区两侧超导体的超导电子对的波函数的位相差 $\Delta\phi$ 有直接关系(参见“超导电子学”),$\Delta\phi$ 与空间和时间 t 的关系由如下约瑟夫森方程来表示(在高斯单位制下):

$$\nabla^2(\Delta\phi)-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\Delta\phi)=\lambda_J^{-2}\sin(\Delta\phi)$$

这是二阶非线性方程式,其中 $v=c(4\pi Cd)^{-\frac{1}{2}}$ 是结中电磁波传播速度,c 和 C 分别是真空中光速和单位面积的结电容,$d=\lambda_1+\lambda_2+l$ 为势垒区磁场的有效穿透深度,λ_1 和 λ_2 分别是势垒两侧超导体的伦敦穿透深度,l 是势垒厚度,$\lambda_J=(\hbar c^2/8\pi edJ_c)^{\frac{1}{2}}$ 称“约瑟夫森穿透深度”,可理解为位相差 $\Delta\varphi$ 穿透结的距离,通常为毫米量级,$\hbar$ 是除以 2π 的普朗克常数,e 是电子电荷量,J_c 为最大约瑟夫森电流值。

约瑟夫森穿透深度 Josephson penetration depth　见“约瑟夫森方程”。

微波感应阶梯 microwave-induced steps　见“交流约瑟夫森效应”。

超导量子干涉器件 superconducting quantum interference devices(SQUID)　在磁场中约瑟夫森结两侧超导体的电子对的宏观量子波函数的位相差,受到磁场的空间调制而有变化,这就导致约瑟夫森电流的相干性使隧道电流 $I_c(H)$ 有类似于光学中的干涉现象。例如有外磁场时的直流约瑟夫森效应中可出现类似于光学中单缝衍射图像就是这样。利用此类相干性制成的器件称超导量子干涉器件,例如直流 SQUID 和射频 SQUID,可大为提高对磁场的灵敏度和分辨率。

直流 SQUID D. C. SQUID　用两个约瑟夫森结并联,与单个结相比较可大为增加环路磁通量的面积,相位差也变大,而临界电流是环路包围的磁通量 Φ 的周期函数,从而回路超导电流对磁场的反应更灵敏,大大提高了分辨率。由于检测时是使器件在直流下以有电阻的方式运行,此时器件两端的电压也是 Φ 的周

期函数，这种装置就称为直流 SQUID，全称双结直流 SQUID。如环面积约 $0.1cm^2$，可能观察到的信噪比能高达一个条纹的千分之一的干涉条纹，则可检测到 10^{-9}高斯的磁场变化，实际设计时还可观察到更为小得多的磁场变化。

射频 SQUID RF(Radio frequency) SQUID 超导回路中只有一个超导结，例如一个超导结或弱连结镶嵌在同样超导材料的环上。在工作时，由装置的一个射频电流加偏压形成的谐振回路与其耦合来检测，称射频 SQUID，全称为单级射频 SQUID。它的优点在于电压增益约十倍，对噪声并不敏感，因而有效地增大有用的信号功率等。

磁强计 magnetometers 由于约瑟夫森效应的超导电流对磁场很敏感，利用这种效应来精细测量磁场的装置称磁强计，包括直流 SQUID 和射频 SQUID 等在内实际上均是磁强计的一种。由于精密的磁强计现已达到可测量 10^{-11}高斯的磁场灵敏度，所以可用来探测磁场很小变化的位移，如可用来作生物磁信号，医疗磁性诊断和引力波等的研究等。它的应用范围很广，如磁心脏探测器，重力仪，探测含磁性的矿，作相关的监视器和检测器等等。

伏特计(电压表) voltmeters 这里指的是利用约瑟夫森效应来测量小电位差的仪器。例如在双结直流 SQUID 环路内放置一超导线圈，并和一小电阻相连组成检流计，检测环内磁通改变所致的线圈回路电流，从而可测出电位差。用这方法测电位差灵敏度很高，约 10^{-17}伏。

超导磁体 superconducting magnet 利用超导电流产生磁场制成的超导磁体其形式是多样的，如可作为磁屏蔽的空心超导体，又如圆筒形磁体，环形线圈，鞍形线圈等。在符合磁体性能要求上，如对材料的选择，制造工艺，它们能承受的临界电流，产生的磁场强度，低交流损耗和稳定性等问题均需考虑。超导磁体在物理学、化学、生物学和医学等的研究和应用上均起有相应的重要作用。超导强磁体，例如 Nb_3Sn 在 $88kO_e$ 磁场中还能承受 $10^5A/cm^2$ 的电流，此类磁体可用于高能加速器，受控热核反应，磁流体发电，超导电机，能量储存，磁悬浮装置等等，是常规磁体所不能比拟的，如体积小，重量轻，处在超导态工作无能耗，所以耗电量比常规磁体少得很多，但功能却大得多。由于需在临界温度 T_c 以下工作，所以需有保持温度在 T_c 以下的制冷设备。

实用超导材料 practical superconductive materials 在性能上具有实用价值、满足主要所需相对好的基本性能要求的超导材料称实用超导材料。这些材料主要基本要求应具有高临界温度，高临界磁场，高临界电流，高稳定性和重复性以及低交流损耗。此外，在制备实用用品过程中要求生产工艺方式较简单，使用上较方便，成本较低，材料的其他性能，如力学性能等也能满足所需要求等。总之，实用超导材料的选择均从相对比较中来挑选合适的适用材料。

超导悬浮 superconductive suspension 或称超导磁悬浮，是利用超导磁体之间，超导磁体与磁性物体或被感应产生的磁场之间同性磁极间磁场的相斥作用，可使相对物体因斥力超过重力而悬浮起来，称超导悬浮。利用超导悬浮可制造超导陀螺仪，无磨擦轴承，时速可达 500 公里的超导磁浮列车等。超导磁浮列车在日本在实验上已获成功，正在进一步改进力求能实用化。它的原理是利用安装在列车上的超导磁体和安装在 U 形混凝土轨道上的线圈在列车运行时，它们之间产生两个相反的强磁场而导致强的斥力使列车悬浮，从而使列车与轨道间无磨擦而加快了列车的运行。

超导电机 superconductive motor 与常规电机主体类似，在这里，若静止的励磁线圈和旋转电枢都是超导的，称全超导电机；若静止励磁线圈为超导体，但旋转电枢是正常导体，称半超导电机。此外，也有直流和交流超导电机之分。对直流超导电机，由于超导电流几乎无能耗，一些超导材料所制的励磁线圈产生的磁场可在 5 万高斯以上，电机输出功率可大为增高，且重量轻，体积小，这对航空和潜水艇等的用电甚为有利。交流超导电机由于有交流损耗，尚需附加低温冷却器设置，但日本 7 万千瓦级的超导发电样机的实用化试验已取得成

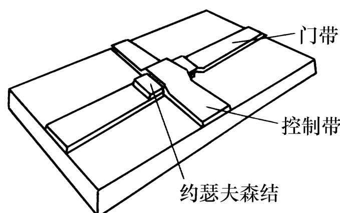
功。

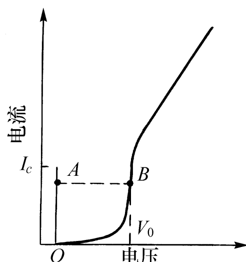
超导储能 stored energy of superconductivity 由于超导磁体环流在零电阻下无能耗运行，所以超导线圈中可持久地储存电磁能，且在短路情况下运行，称超导储能。它的优点在于：(1)一次储能可长期无损耗地保存，又可瞬时放出；(2)储存能量高，现已可达 $10^7 J/m^3$ 以上；(3)用低压电源励磁即可；(4)装置体积小；(5)节省了常规所需的送变电设备和减少送变电损耗。

输电 output current 用超导导线输送直流电流，由于无阻就无能耗，输电量也高。设想可将超导线在安置的超流环境中埋在地下成为超导电缆。现时不少高温超导体其临界温度在液氮温度以上，可将此类超导线放入液氮杜瓦管中来输电，但长距离输电目前尚不现实，期待超过室温超导材料的发现和实用化才行。

超导加速器 superconducting accelerator 加速器的主磁体是用超导磁体制成的称超导加速器。如超导直线加速器，超导回旋加速器，超导同步加速器。超导加速腔可在很小微波功率下产生很强的加速电场，并在很小磁激励下产生很大的约束磁场，从而大大减小加速器的尺寸和降低功率消耗，这是常规加速器所莫及的。在高能粒子物理研究中，需将带电粒子加速到极高的能量，而包括加速器对粒子的加速，转向和聚焦等，以及检测高能粒子或原子核反应生成的基本粒子等的气泡室均需有强大的磁场，而超导磁体产生的强磁场在加速器上已被一些国家所使用，如制造成超导同步加速器。

超导元件 superconducting component 利用超导⇌正常转变，即电阻无⇌有转变，或使电流从一个通道转移到另一通道，可制作逻辑开关元件。利用处在超导态的无阻持久电流，可作为存储元件，这些统称为超导元件。也可利用约瑟夫森器件的伏-安特性来作超导元件。例如对 S-I-S 结，在电压 V 未达到电流 I_c 对应的 V 时，如图中 A 点对应 $V=0$ 时的 I_A 是无阻的，若控制带上有一很小的电流脉冲，其产生的磁场使 I_c 降低到 I_A 以下，但点 A 跳到 $V\neq0$ 的点 B，电流就从一个通路转移到另一个通路可作为开关元件，其开关时间约 10^{-10}秒。





超导计算机 superconducting computer 这是利用超导元件为计算机元件的计算机。超导计算机从实验到实用阶段已取得成功。如1989年日本研究人员使用约瑟夫森超导元件制造了信息处理机和记忆器，并将4块芯片连接起来，分别起有运算，控制，指挥记忆和数据记忆的作用。这种电脑仅用6.2毫瓦的电力为动力，其运算速度达到每秒10亿次，并已在5毫米角芯片上安装3万个约瑟夫森结的超导开关，现正研制开发超导集成电路器件，能在光纤上达每秒1万亿位通信。

四、低温工程和低温技术
Low Temperature Engineering and Technique

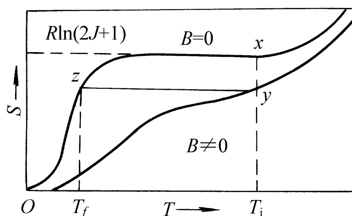
低温工程与技术 low temperature engineering and technique 包含获得和保持低温的手段，包括制冷机的设计，设备制造，安装，调试，低温的控制，调节，测量，低温恒温装置，以及有关的附属装备和与相关实验的低温配套等等的工程技术，也包括在低温下物质有关量和参数的测量技术等。一般制冷机可按一定的热力学循环过

程而获得低温，也可用低温的液体作为冷剂，利用各种绝热方式制成的容器或恒温器来保持低温。低温工程和技术可用于气体液化，如空气、氮、氧、氢和氦等气体液化，一般用热力学的节流过程和绝热膨胀过程的降温原理来制造制冷机。对极低温的获得，如1K以下温度，则又需包括例如稀释制冷，^{3}He绝热压缩制冷，顺磁盐绝热去磁制冷和核去磁制冷等手段。以上这些制冷手段可使降温在120K至几微开[尔文]范围内进行科学研究。低温工程和技术的发展已揭示了低温物质世界的不少奥秘，如超导和超流现象，一些生命细胞在低温下的顽强性等等，并在航天技术，真空技术，低温电子学，高能物理以及生物学，医学等方面有广泛应用。

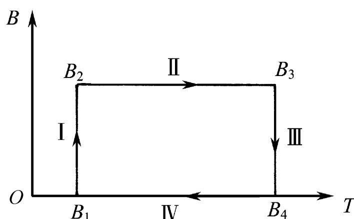
磁卡效应 magnetocaloric effect 顺磁与铁磁性物质在外磁场的作用下，磁矩由杂乱变为有序，原子磁矩之间及与外磁场之间的相互作用能降低，它的磁熵减小，排出熵的过程也就是放热的过程。反之，在取消磁场的过程中，磁性物质的磁矩由有序而变为杂乱，从外界吸收能量，磁熵增加，在系统绝热的情况下则磁性物质本身降温。这种由外磁场变化而引起磁性物质放热或吸热的现象称为磁卡效应。

室温磁制冷 magnetic cooling at room temperature 磁性物质在外磁场的作用下，其磁熵变为 $\Delta S_{\mathrm{m}}(T,\boldsymbol{H})=\int_{H_1}^{H_2}\left(\frac{\partial M}{\partial T}\right)_H \mathrm{d}\boldsymbol{H}$，其中 M 为磁性物质的自发磁化强度，由 $M(T,\boldsymbol{H})$ 的计算可知 $\Delta S_{\mathrm{m}}\propto J(J+1)\times g^2/(T-T_{\mathrm{c}})^2$，亦即角动量 J、朗德因子 g 和居里点温度 T_{c} 决定了磁熵变 ΔS_{m}，尤其是 T_{c}。将 T_{c} 在室温附近的磁性材料作为制冷工质，可以在温度接近 T_{c} 的温区中得到很大的磁熵变，由 $\Delta Q=T\Delta S$ 即获得了室温区的制冷量。20世纪70年代后期人们利用金属钆及其合金作为工质，在0～7Tesla的磁场中循环得到了制冷的效果。近年来国际上利用 $Gd_5(Si_2Ge_2)$ 合金取得了更好的结果，在钙钛矿结构的LaCaSrMnO的锰系氧化物中，由于其不同的组分有不同的居里点温度而成为一种很有前途的磁制冷工质。

顺磁盐绝热去磁制冷 cooling by adiabatic demagnetization of paramagnetic salts 在顺磁盐中，磁性离子磁矩间的相互作用很弱，这种弱相互作用等效于磁性离子受到一个弱内场 $\boldsymbol{B}_{\mathrm{int}}$ 的作用，能级间隔为 $\Delta E_0=g\mu_B B_{\mathrm{int}}$，在起始温度 $T_{\mathrm{i}}\approx 1\mathrm{K}$ 时，$\Delta E_0\ll kT_{\mathrm{i}}$，也即磁性离子在 $2J+1$ 个能级上的概率相等，所以磁矩的取向是混乱的，在施加外场 $\boldsymbol{B}$ 后，使能级间隔 $\Delta E_{\boldsymbol{B}}$ 增大为 $\Delta E_{\boldsymbol{B}}=g\mu_{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{B}^2+\boldsymbol{B}_{\mathrm{int}}^2)^{1/2}$，可使 $\Delta E_{\boldsymbol{B}}\gg kT_{\mathrm{i}}$，使各能级的占据概率不等，相当于外场 $\boldsymbol{B}$ 使磁性离子的磁矩取向有序，系统的熵减小，磁化热 $\Delta Q=T_{\mathrm{i}}(S_x-S_y)$ 通过等温磁化而排出，这时使该顺磁盐在绝热的条件下去除外磁场，能级间隔又回到原来的 ΔE_0，然而其熵没有变化，磁矩仍为有序排列，温度将从 T_{i} 降到低得多的 T_f，产生了制冷的效果，其温熵图如下所示。

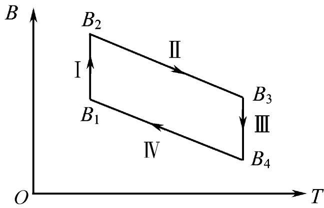


埃利克逊磁性制冷循环 Ericsson magnetic cooling cycle 在室温磁制冷中，这是一个比较好的热力学循环。它由两个等磁过程和两个等温过程构成一个循环，它有助于防止在磁性系统熵变过程中晶格熵的侵入，这在工程应用中十分有利。



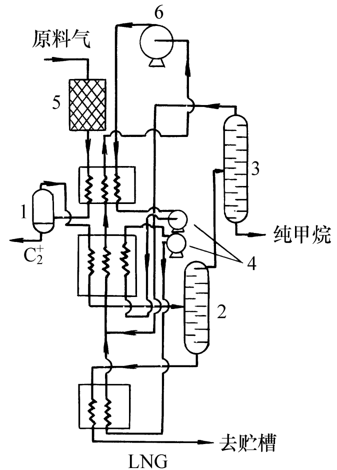
Ⅰ.等温磁化；Ⅱ.等磁升温；
Ⅲ.等温去磁；Ⅳ.等磁冷却

斯特林磁性制冷循环 Stirling magnetic cooling cycle 这是在室温磁制冷中，由两个等温过程和两个等磁化过程构成的磁热力学循环。此循环由图可见Ⅰ为等温增磁过程；Ⅱ为等磁化升温过程；Ⅲ为等温去磁过程；Ⅳ为等磁化冷却过程。



空气液化 liquefaction of air 是指把气态空气变为液态空气的过程。空气是由多种组分构成的混合气体，其中78.09%是氮气；20.95%是氧气。可用等焓膨胀或等熵膨胀，不断地从空气中取走热量而使其降温，当它降到冷凝温度以下时就开始液化，但是其中氧组分的冷凝温度是90.2K；氮组分的冷凝温度是77.3K。所以当混合气降到81.5K时就开始出现液态空气，这时液体中的氧比例高，再继续取走热量时，液体中的氮成分逐渐增加，液体的温度也就逐渐降低，等空气全部液化时，液空的沸点将是78.6K。

天然气液化 liquefaction of natural gas 是指把气态天然气变为液态天然气的过程。天然气的组成随气田不同而异，其主要成分为甲烷、氮及C_2～C_5饱和烷烃，液态天然气的物理性质随天然气的不同而有所变化，它在液化前需要预处理，先脱除混合气中所含的硫化氢、二氧化碳及水分等杂质，然后用逐级冷冻循环或用带膨胀机的冷冻循环，使天然气降温到冷凝温度而液化，其流程见右栏图。



1. C_2^+ 以上其他重烃类分离器；
2. 脱氮塔；3. 氮-甲烷分离塔；
4. 膨胀机；5. 预净化装置；
6. 循环压缩机

空气分离 separation of air 空气是混合气体，它的主要组成为氮、氧、氩、氖、氦、氪、氙、氢。其中氮所占体积百分比为78.09%、氧为20.95%。空气的分离实质上便转为氮、氧的分离或者再提取一种或几种稀有气体。利用空气液化的方法，先将空气液化，然后根据各组分的沸点不同，在液空的沸点78.6K下，氖、氦、氢的冷凝点远低于78.6K，仍为气态可以抽走。氪的冷凝温度为119.9K，它常温下的体积百分比为10^{-6}。氙的冷凝温度为164.1K，它常温下的体积百分比为0.8×10^{-7}，都是微量的。氩的冷凝温度为87.5K，它的体积百分比为0.93%，这三种可另加专门的精馏塔进行精馏而分离。氮、氧可在空分塔中进行分离，让混合液自上而下运动，让接近冷凝温度的混合气自下而上的运动，在交汇过程中，由于氧、氮的沸点不同，在热交换的时候，进行了质量交换，使液体中氧的浓度不断增加，在气体中氮的浓度不断增加，最终达到分离的目的。

等温压缩 isothermal compression 气体温度在压缩的过程中保持不变称为等温压缩。在理想情况下，可看成是可逆压缩过程。工程上的处理为压缩机加水冷却系统，经压缩后的高温气体经过冷却水，把压缩热给冷却水带走，在等温压缩中，气体的熵变小，这也是气体制冷和液化的最关键一步。

在温度 T 下将气体从状态1等温压缩到状

态 2,压机做功 W,冷却水带走压缩热 Q,焓的变化为 H_2-H_1,可得 $H_2-H_1=W-Q$ 则

$$Q=W+(H_1-H_2)$$

气体的熵降为 $S_1-S_2=\frac{Q}{T}=\frac{W+(H_1-H_2)}{T}$。所以此时可通过等熵膨胀或等焓膨胀来降温以达到制冷的目的。

等焓膨胀 isenthalpic expansion 1852 年英国人焦耳和汤姆逊,用一个与外界绝热的管子,中间装一阻碍气体通过的多孔塞,让高压气体从一端 A 持续不断地流向另一低压端 B 而产生膨胀,这时有 $U_A+P_AV_A=U_B+P_BV_B$ 也即两边的焓 $H_A=H_B$,所以这现象称为 J-T 效应,也称为等焓膨胀。在实际的低温工程中让高压气体通过节流针形阀或毛细管来实现等焓膨胀。实验表明,对于气体的等焓膨胀,存在一个节流转换温度 T_r,节流前的气体温度超过 T_r 时,其转换系数 $\mu=\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_H<0$,当低于 T_r 时 $\mu>0$,可见在 $\mu<0$ 时,经过等焓膨胀气体升温,所以只有温度低于 T_r 时 $\mu>0$,等焓膨胀后才可能降温。

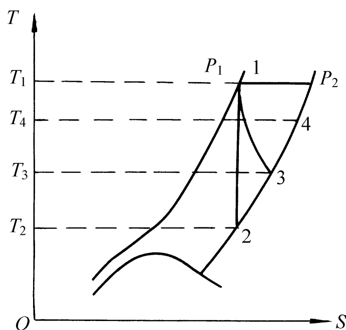
J-T 效应转换温度

	^4He	H_2	Ne	N_2	O_2
T_r/K	51	205	220	621	893

等熵膨胀 isentropic expansion 气体在膨胀机中绝热膨胀对外做功,由于同外界没有热量的交换,是个等熵过程,称为等熵膨胀,膨胀所做的功以内能的减少为补偿,于是温度就下降,达到制冷的目的。

根据热力学第一定律 $dQ=dU+pdV$,对于理想气体 $dU=c_vdT$,在绝热的情况下 $dQ=0$,所以 $0=c_vdT+pdV$,可得 $-dT=\frac{p}{c_v}dV$,只要系统对外界做功,系统必定降温。

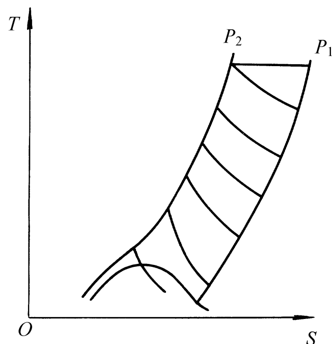
绝热膨胀时,温度由 T_1 降到 T_2,压力由 p_1 降到 p_2,系统对外做的功 $W=U_1-U_2=c_v(T_1-T_2)=c_vT_1\left[1-\left(\frac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{K-1}{K}}\right]$,其中 $K=\frac{c_p}{c_v}$,可见系统对外做的功与膨胀前气体的温度 T_1 成正比,这说明 T_1 越高,对外做功越多,即内能减少也越多,气体温度下降也越显著,是在高温区制冷的有效手段,优于等焓膨胀制冷。在实际的膨胀机上由于摩擦等不可逆因素,所以膨胀后并不降到 T_2 而是降到 T_3,但比等焓膨胀降到 T_4 的温度仍低得多,由此可定出膨胀机的效率 $\eta=\frac{\Delta H_{实}}{\Delta H_{理}}=\frac{H_1-H_3}{H_1-H_2}$,一般的可在 0.6～0.9 之间。

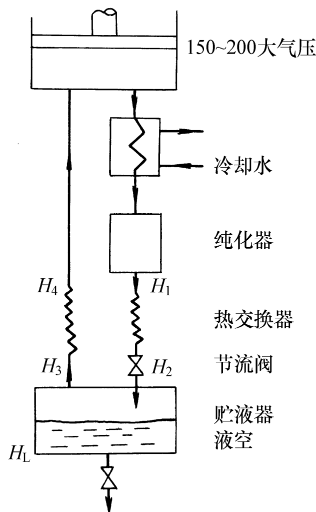


林德循环 Linde cycle 1895 年德国人林德采用了对流热交换器,巧妙地利用焦耳–汤姆逊效应,使节流后的冷空气去冷却节流前等温压缩后的高压空气,使节流前的压缩空气温度不断的降低,因而也使节流后的低压空气进一步降低,直到液化温度,使空气节流后成为液体。

它的循环过程如图所示:一个大气压下的新鲜空气进入压缩机被压缩到 150～200 个大气压,压缩热交给冷却水,经过纯化器去除水分与二氧化碳,然后进入热交换器的高压管道,再经过节流阀被节流膨胀到 1 大气压,空气被降温。节流后的冷空气进入热交换器的低压管道,与热交换器中的高压空气进行热交换,结果高压空气被冷却,所以节流前的高压空气温度不断地降低,节流后的空气温度也越来越低,一直降到空气液化温度。它的液化率 $x=$

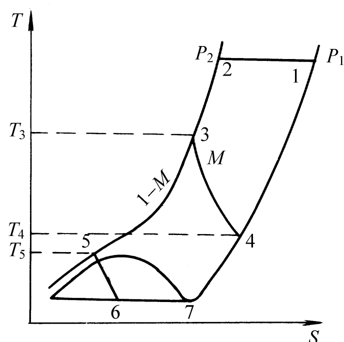
$\frac{H_4 - H_1}{H_4 - H_L}$，其中 H_L 为液体的焓。

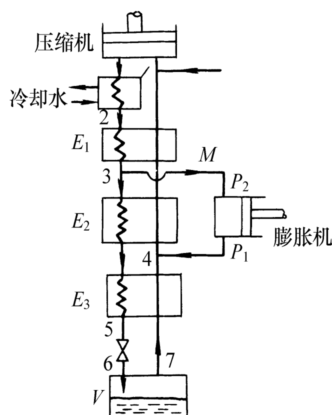




克劳德循环 Claude cycle　1902 年克劳德首先将活塞式膨胀机应用于制冷循环，开创了液化气体的新方法。在这循环中由于大部分高压气体经过膨胀机的绝热膨胀，使气体的内能以功的形式排出而大大提高了制冷循环的效率。

从流程图中可见，先用压缩机将气体压缩成高压气体，经过冷却水，取走压缩热，形成等温压缩过程，然后进入热交换器 E_1，冷却后的气体分成两部分，其中 M 部分进入膨胀机中绝热膨胀，另外$(1-M)$部分进入热交换器 E_2

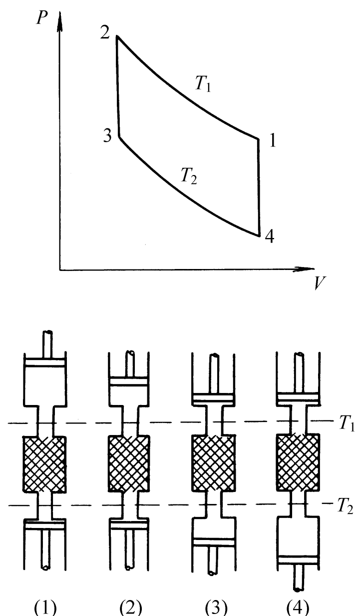




中。进入膨胀机的气体从高压 P_2 膨胀到低压 P_1，温度由 T_3 变成 T_4。膨胀后的低温气体返回到热交换器 E_2 的低压侧，与 E_2 中高压侧的高压气体进行热交换，然后通过 E_1 返回压缩机的吸气口。在 E_2 中被冷却的$(1-M)$部分高压气进入热交换器 E_3 高压侧，与节流后的低压气体再进行热交换，进一步降低温度，这部分气体离开 E_3 后，经过节流阀节流，节流后的气体进入容器 V，然后返回 E_3、E_2、E_1 的低压侧，最后到压缩机的吸入口，这样几次循环以后在 E_3 的末端积蓄起冷量，使高压气再经过时将冷却到临界温度以下，再节流时就有部分气体被液化。其液化率 $x = \frac{H_1 - H_2 + M(H_3 - H_4)}{H_1 - H_L}$，其中 H_L

为液体的焓。循环制冷量 $Q=H_1-H_2+M(H_3-H_4)$。

斯特林循环 Stirling cycle 是由两个等温过程和两个等容过程构成的热力学循环，正循环为发动机循环，其逆循环被荷兰菲利浦公司应用，研制成一种小型、高效的制冷机，此循环称为斯特林循环。

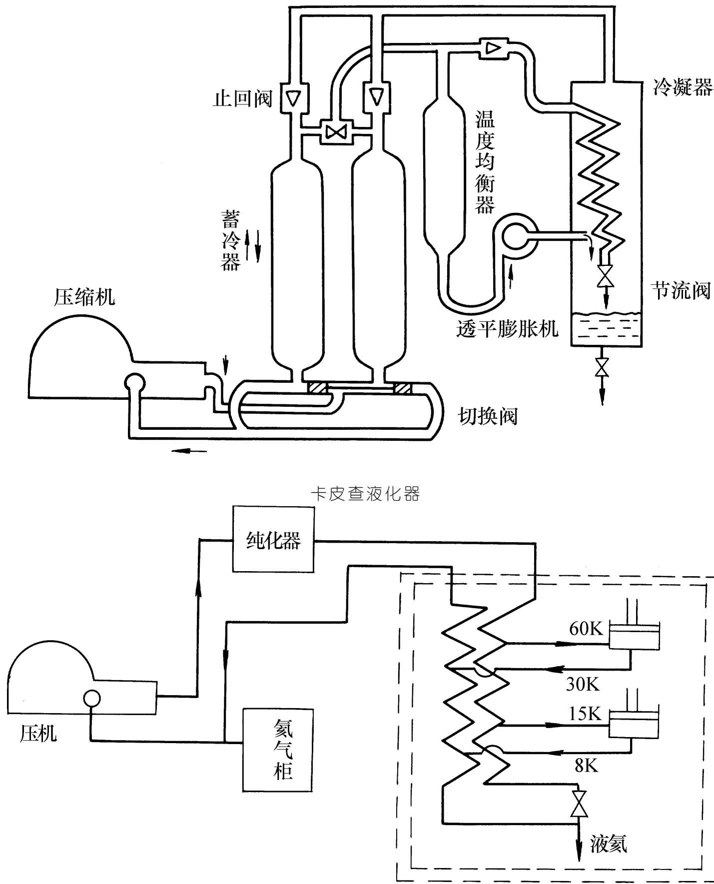


该循环的工作过程见装置图，它有两个往复活塞的气缸，两缸经过蓄冷器连通，其中充满工作气体：氦或氢。上面的是压缩缸，处在室温，下面的是膨胀缸，处在低温，是制冷区。蓄冷器是理想的，即气体通过时无阻力、没有死容积、气体通过时热交换是完全的。当气缸处于位置(1)时，工质处在压缩腔。(1)→(2)的过程，压缩活塞向下运动，工质被压缩，压缩热被冷却水带走，称为等温压缩过程。(2)→(3)压缩后的工质等容地从室温端的压缩腔经过蓄冷器被冷却，然后转移到膨胀腔，此等容过程由两个活塞的同步位移来实现。(3)→(4)是工质在膨胀腔中作等温膨胀制冷，而从气缸壁吸热，使被制冷的气体冷凝在低温空间的冷外表面上。(4)→(1)是工质在等容条件下从低温端的膨胀腔转移到压缩腔，在经过蓄冷器时被加热，使其温度回升到室温。这样就完成了一个循环。理想的斯特林循环是热力学可逆的，它的制冷系数等于卡诺循环的制冷系数 $\varepsilon=\frac{T_2}{T_1-T_2}$。

卡皮查液化器 Kapitza liquefier 1934 年俄国人卡皮查首次改进了克劳德循环，用膨胀机代替液氢的预冷级，成功地液化了氦气。以后他于 1939 年又改进了他的循环流程，推出了一种低压流程的空气液化器，使它别具一格。他用透平压缩机将空气压缩到 6～7 大气压，进入两个并联的蓄冷器中的一个的底部，空气与蓄冷器的填料进行热交换，空气被冷却，空气中的水与二氧化碳等杂质被冻结在填料的表面上。经过蓄冷器冷却后的空气分为两路，其中一路占气体的大部分经过温度均衡器，然后进入透平膨胀机进行绝热膨胀对外做功，使温度进一步降低，从透平膨胀机出来的冷空气的压力略高于 1 大气压，穿过冷凝器盘管的外部空间，以冷却冷凝器盘管内的压缩空气，然后进入另一只蓄冷器，使其填料冷却，在盘管内被液化了的空气经节流后温度进一步降低，同时也有部分被蒸发。两蓄冷器在 1～5 分钟内切换一次，这种循环是一种全低压的工艺流程，单位产量功耗低，是大中型液化与气体分离的有用工艺流程。

柯林斯液化器 Collins liquefier 这是美国人柯林斯研制的一种克劳德循环的氦液化器，它使用了两个膨胀机，其中之一代替了预冷级，同时把膨胀机、节流阀及热交换器等部件都安置在一个大气压的静止氦气氛中，而不是在高真空中，然后将它们装在一个不锈钢的杜瓦容器中，避免了由于真空破坏而产生的麻烦，使用了一个高效率的连续式柯林斯热交换器，对氦的液化设备作出新的发展。

吉福德-麦克马洪循环制冷机 Gifford-McMahon cycle refrigerator 美国锡拉丘兹大学的吉福德与麦克马洪于 1959 年提出利用高压气体被绝热抽气来达到制冷目的，这种循环称为 G-M 循环，它的热力学过程为两个等压过



卡皮查液化器

柯林斯液化器

程与两个等容过程构成一个循环。用它构成的制冷机有运行周期长、性能稳定可靠、振动小与使用方便等优点,故在卫星通讯等方面得到广泛的使用。

G-M 制冷机由各自独立的压缩系统与制冷系统组成。压缩系统包括:往复式压缩机、高低压室、冷却器与纯化器等。制冷系统由膨胀机、蓄冷器与传动机构组成。

G-M 制冷循环的四个步骤为:

(1) 压力升高:在排出器处在最低点时,打开进气阀,高压气进入 V_1 室和蓄冷器形成绝热压缩,由于蓄冷器填料的大热容使气体温度没有明显升高。

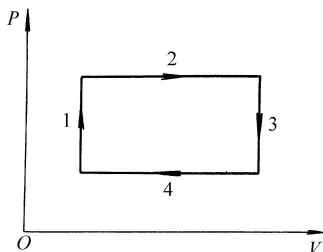
(2) 气体吸入:当排出器向上移动时,热端 V_1 内的高压气经蓄冷器转移到冷端 V_2,气体因蓄冷器的冷却,体积缩小,所以另有一部分高压气从进气阀被吸入,在排出器到达上死点前进气阀被关闭。

(3) 气体膨胀:排出器在上死点不动,排气阀打开,V_2 中气体被压缩机低压进气管绝热抽走,形成西蒙膨胀过程,结果气体温度降低制取了冷量。

(4) 气体排出:排出器从上死点向下移动,将膨胀后的气体从 V_2 中压出,直到排出器达到

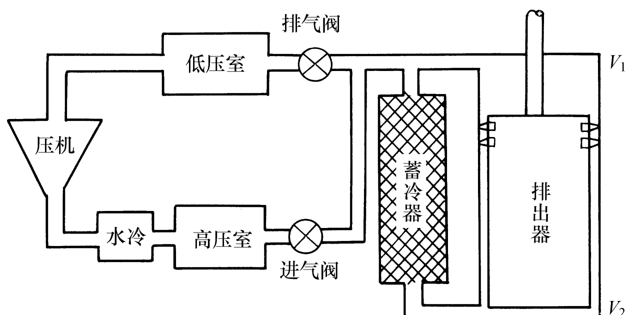
下死点。以上四个过程便是一个 G-M 循环。

其制冷系数比斯特林循环小，制冷量 $Q=V(P-P_0)$，其中 $V=V_1=V_2$，P 为高压，P_0 为低压。

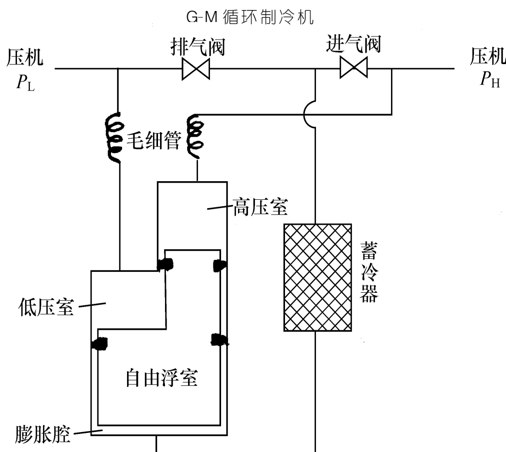


沙尔凡制冷机　Solvay refrigerator　它的热力学循环与 G-M 循环相同，是高压气体被绝热抽空降温。美国于 1965 年开始研制，它用一个自由浮塞和小孔，代替了曲轴传动与气动装置，它的结构如图：自由浮塞处在一个汽缸内，上部分为面积相等的两个室，一个是高压室，另一个为低压室，它们通过小孔节流元件和高、低压管道相连。当活塞静止时，活塞上部所受的压力 P_1 等于高、低压力的平均值 $P_1=\frac{1}{2}(P_H+P_L)$。

其循环过程为开始时自由浮塞处于汽缸最低部位置，进气阀开，高压气 P_H 经蓄冷器流进浮塞下部的膨胀腔，当膨胀腔压力大于 P_1 时，

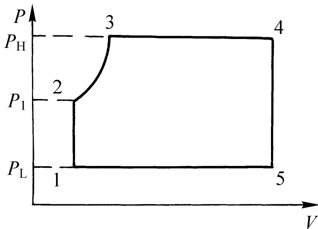


G-M 循环制冷机

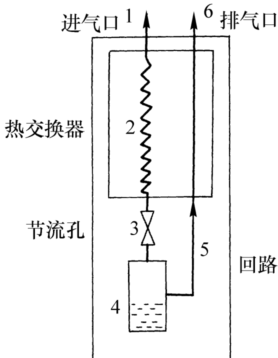


沙尔凡制冷机

浮塞向上移动。由于毛细管对气体流动阻力大，从而限制了高低压室内气体流动。故浮塞上移时对浮塞上部的高低压室内气体进行压缩，此压缩气体慢慢地从毛细管中流出，直到浮塞移到最上部位置为止，上升速度受毛细管控制，此时膨胀腔体积达到最大值，气体压力也达到 P_H。然后，进气阀关闭，排气阀开启，使膨胀腔内高压气体被压缩机低压进气抽走，产生制冷效应，这时浮塞上部的高压室仍与高压相联，它的作用使浮塞向下移动，直到最低位置时完成一个制冷循环。

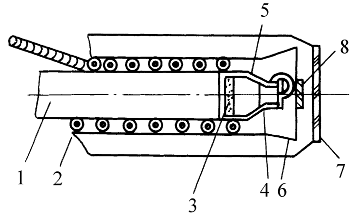


焦耳-汤姆逊效应制冷器 Joule-Thomson effect refrigerator　70 年代人们直接利用焦耳-汤姆逊制冷效应，制成微型制冷器。它的流程如图所示。如制冷工作物质为高压氮气，它的转换温度高于室温，当高压氮气由进口 1 进入热交换器 2，通过节流孔 3 节流膨胀而产生降温，降温后的氮气经过回路 5 进入带翅片热交换毛细管的外壁空间，与热交换管内的高压氮气换热，然后由排气口 6 排出。这样就使高压



氮气在比以前温度低的状态下节流，节流后的氮气温度变得比以前更低。这过程不断地进行，使节流后温度越来越低，直到一部分氮气液化而得到 77K 的低温。

焦耳-汤姆逊效应制冷器对负载冷量不大、使用时间又不长的单元探测器来说很理想，它



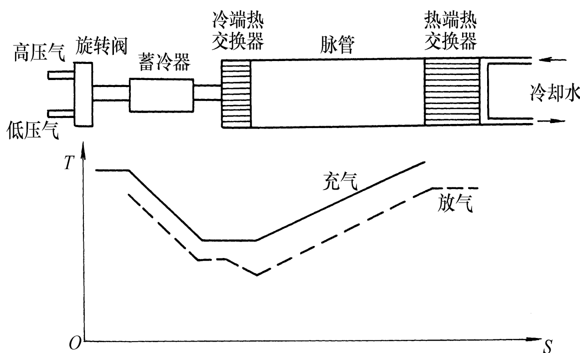
1. 芯轴；2. 翅片毛细管；3. 软垫；
4. 节流孔；5. 液氮和氮气导出孔；
6. 锥形腔；7. 红外窗口；
8. 器件（待冷）

结构简单、重量轻、价格低、制冷速度快，不用动力。在空对空导弹上得到广泛应用。它的缺点是效率低、工作压力高（在 70～500kg/cm^2），对气体的纯度要求高（>99.99%）。

脉管循环制冷机 pulse tube refrigerator
1964 年吉福德和朗斯沃思同时提出脉管制冷循环，其原理是利用高压气体被绝热抽空而达到制冷的目的。脉管一端封闭，另一端接蓄冷器和冷端换热器——制冷器，当高压气体进入脉管时，呈现层流状。这样在充气时，由于压缩而在脉管中形成温度梯度，封闭端的温度最高，压缩热被冷却水带走。这样在脉管中高压气体被抽空时，在管的出口端形成低温制冷区。

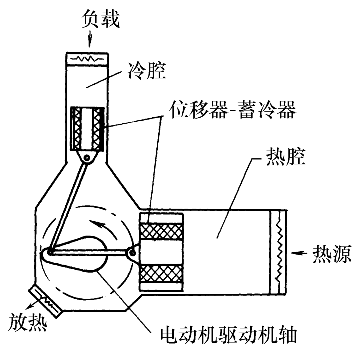
维勒米尔制冷机 Vuilleumier refrigerator
在 1918 年由维勒米尔提出的一个热泵循环。它是一个定容循环，应用位移器进行工作。位移器只简单地使气体从制冷机内空间的一部分运动到另一部分，而无需在一封闭空间压缩气体，所以它具有长期工作的优点。

制冷机有两个气缸，用一个小电机带动缸内的两个位移器以近 90°的相位差进行往复运动。在每个位移器内有一个蓄冷器，它允许气

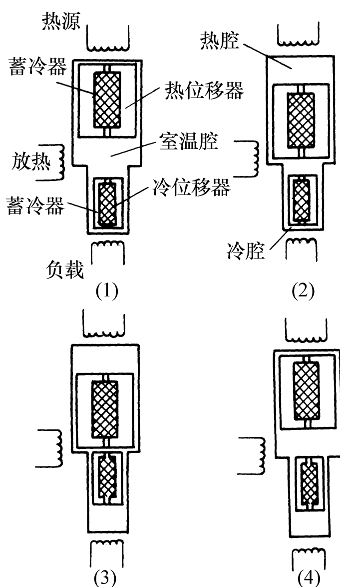


脉管循环制冷机

体从汽缸的一端向另一端流动,并交替地贮存和释放热能。在动力缸的热端加入热量,热量又从环境温度端(机轴箱)排出。低温负载的热量在制冷机冷缸的冷端吸收,也在机轴箱放



出。在示意图中标明了两个位移器的四个位置构成一个循环。位置(1),工质主要处于室温腔。(1)→(2)热位移器从热端向室温端运动,使得工质从室温处向热腔作定容流动,引起制冷机内压力升高,也就压缩了仍处在室温腔的工质。(2)→(3)冷位移器运动,使处在室温腔的工质流动到冷端。(3)→(4)工质从热腔返回室温腔,使得机内压力降低,因而工质在冷腔膨胀。(4)→(1)冷位移器运动,使气体返回室温腔,从而开始一新的循环。它的突出的优点是不用机械压缩机和直接利用热能作为主要的能源,很适用于航空与航天系统中小冷量闭循环低温制冷装置。

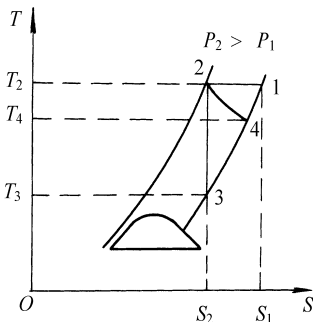


冷剂 cryogen 低温工程及低温物理实验中,要把装置或试样降到所需的低温,其最简便的方法就是将它们浸入低沸点的液体中,即可达到该沸点的低温,这种低沸点的液体就称为冷剂。该冷剂如果再减压便可取得沸点到三相点甚至更低的低温。通常的冷剂有液氧(90.2K),液氮(77.3K),液氢(20.3K)和液氦(4.2K)。其中液氢可作火箭燃料,同时也是最理想的未来待开发的能源,但液氢易燃烧爆炸,作冷剂使用时要特别小心,液氧是氢氧火

箭的助燃剂，有些物质如油、棉花等与液氧接触后极易爆炸，其危险性不亚于液氢。液氦可以通过减压的方法获得 0.7K 的低温。

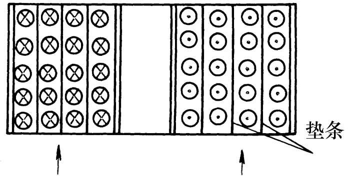
气体纯化 purification of gases 在气体液化之前，必须把气体中的杂质去除的过程。按照杂质的种类，可以采取化学方法、冷冻方法和物理吸附的方法去除杂质。比如可用碱溶液去除 CO_2，用加热到 300℃ 的镍板催化 H_2、O_2 成为 H_2O 而去除了氢中的氧，利用蓄冷器可以有效地清除容易冷凝的杂质，利用活性炭或分子筛在低温下可以大量吸附那些冷凝温度与它接近的杂质气体。选择利用以上方法可实现气体纯化。

液化器 liquefier 通过热力学过程不断地从气体中取出热量，使气体的温度逐渐下降，直到它的冷凝温度，最后使气体变为液体的机器，称为液化器。其工作原理是利用等温压缩，将气体从常压 P_1 压缩到高压 P_2，经过冷却器取走压缩热，然后采取绝热膨胀或者节流膨胀，从温熵图中来看，等温压缩即从 1→2，气体的熵从 S_1 减小到 S_2。然后绝热膨胀为 2→3，气体温度也就从 T_2 降到 T_3。如果用等焓膨胀，那气体就沿等焓线膨胀到 P_1 的线上 4 点，此时温度也就降到 T_4。把这已降温的气体与膨胀前等温压缩后的气体进行热交换，使第二次膨胀的气体会降到更低的温度，直到气体液化，其主要部件有压缩机、膨胀机、节流阀和热交换器等。

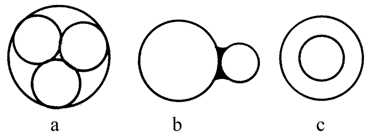


热交换器 heat exchanger 在液化器或制冷机中，一次冷却，比如用一次等焓膨胀或等熵膨胀，不足以使气体降温到冷凝温度，但可以把它的冷量通过一个效率很高的交换热量的设备交给膨胀前的气体以使得膨胀后有更低的温度，这种交换热量的设备称为热交换器，是制冷工程中必不可少的设备。

汉普逊型热交换器 Hampson heat exchanger 它是由一根或多根细紫铜管绕成间距紧密的蛇形管，并将蛇形管置于两环形中间，高压气在细管内流动，而低压气流则在细管外的环形空间中横掠高压管道轴线流动，这种热交换器交换面积大，低压气流的路程短，从而减低了压降，并且结构紧凑，制作简单。

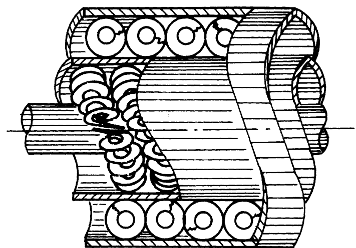


林德型热交换器 Linde heat exchanger 又称为逆流型热交换器，是林德于 1895 年第一次液化空气时所采用的类型，其截面如图。a 型其高压气在内部小管内流动，低压气在小管与大管之间的空间逆向流动，这种热交换器的缺点是体积大、效率低、低压气阻力大，压力降也大。b 型采取二根或多根管平行焊接在一起，制作简单，在一些小型液化器中仍被采用。在一些特殊的情况下还可采用 c 型结构。

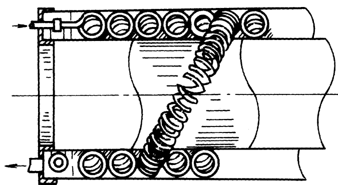


柯林斯型热交换器 Collins heat exchanger 它是由三根同轴管组成的，并在内部两根同轴管外表面紧紧缠有沿边缘方向绕曲的螺旋形铜带，螺旋铜带与被绕的那根管道的外表面及包围它的那根管的内表面软焊在一起。这些螺旋铜带不但增加了传热面积，还提供了一条

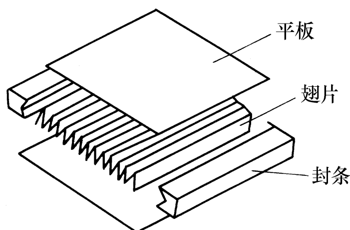
气流热传导的通路。这种热交换器可以制成具有三个环形通道,以便选择与组合进排气的通道以适应不同压力、容积和流动速度的需要。



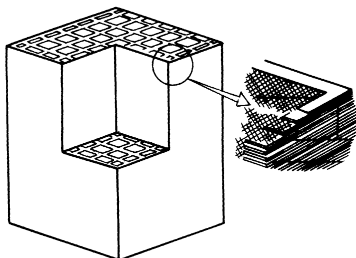
帕金森型热交换器 Parkinson heat exchanger 它是由耐高压的细紫铜管绕制成小直径的螺线管,再将这种螺旋管绕在一根低热导率的薄壁中心管外表面上,并被另一根低热导率的套管包围着,低压气流通过两根管子组成的环形空间返回,它与高压螺旋管之间有良好的热接触,这种热交换器具有高效率、低热容的特点。

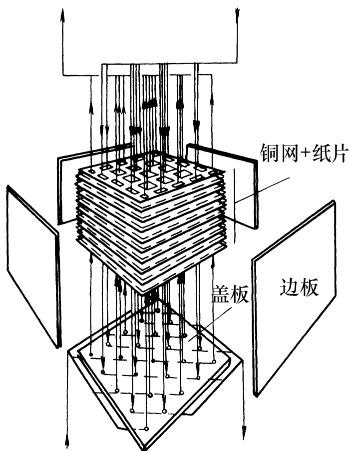


板翅式热交换器 plate wing heat exchanger 铝制板翅式热交换器是在数层平金属板之间紧密地放置波纹状的金属导热翅片,并在每一层的四周加上封条,于温度近 600℃ 的盐溶液炉中整体铅焊而成。翅片的主要作用是强化传热,也有增强两金属板强度的作用,在这种热交换器中相邻两通道之间的热交换,一部分通过平板传递热量,但绝大部分热量是通过波纹翅中传递的,因为平板之间均有波纹翅片,因而大大增加了传热面积,所以它的单位体积内的传热面积比一般管式热交换器大 10 倍以上,达到 4000～5000m^2/m^3。通过各通道之间的不同组合,可得到逆流、错流等形式的热交换器。它具有单位体积传热面积大、传热效率高、流体阻力小、热容量小、结构紧凑及同时允许几种介质进行热交换等优点。



网格式热交换器 net heat exchanger 这种热交换器是荷兰菲利浦公司于 1968 年设计制造的,并且在菲利浦型氦液化器中首先使用,它是由 25～250 目/平方英寸的铜丝网冲出正方形然后与合成树脂制成的隔板组成的,隔板上冲有若干个方形孔,再将隔板与铜丝网交替

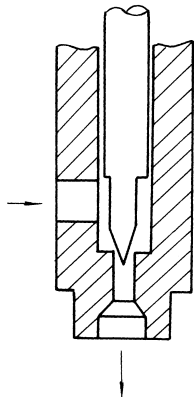




的叠在一起，放在两端的配气封头之间，然后将它放在模子中压紧，并且加热到 150℃，使铜丝网粘结在受热软化的树脂中，直到树脂固化。其方形孔串联形成气体通道，每个气体通道被周围四个相反流动的通道包围，两股气流通过铜丝网进行热交换。它有很好的热接触，且用大量的狭通道代替其他类型的大通道，从而有很高的传热效率，其单位体积的传热面积可达 $3000m^2/m^3$ 以上，它的纵向热导率小，克服了板翅式的缺点。

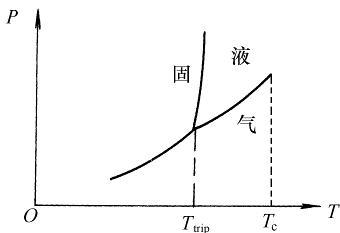
蓄冷器 regenerator　是一种回热式热交换器，在低温循环中，它与热交换器的功能相同，即通过热量的交换，达到积蓄冷量的目的。蓄冷器只有一个通道。冷、热流体分别交替通过，它的传热过程在时间上分为加热与冷却两个阶段。在加热阶段，热流体通过蓄冷器，使蓄冷器中填料被加热，同时流体被冷却；在冷却阶段，冷流体反向通过蓄冷器，使蓄冷器填料被冷却而流体被加热，由于它在冷却热流体的过程会产生低温的物理吸附，使流体得到纯化。它的填料可用铜丝绒、不锈钢丝绒、小铅丸、铝矾及硫化铈等。它的比表面积可达 $3000\sim6000m^2/m^3$，热交换的效率可达 99%，流阻小，流体经过时的压降也小，在液化器和气体制冷机中被广泛的使用。

节流阀 throttling expansion valve　在一个绝热的管子中，装一对气流有较大阻滞作用的多孔物质的塞子。带有一定压力的气流能持续不断地流过多孔塞，形成稳定流动，在塞的两边维持一压力差，这时在塞子的两边即产生温度差，这过程中气体的焓是不变的，称为节流膨胀，也称为 *J-T* 效应。在制冷工业上，使气体通过一针形阀或毛细管来实现节流过程，此阀即为节流阀。



纯化器 purifier　是气体液化过程中的一个重要设备。气体在制冷循环中逐步被冷却降温，在达到冷凝温度以前，气体中的杂质气体将凝结成固体而附着在管道及阀门等处，甚至进入膨胀机，最终使得液化器停止工作，所以在液化过程中安装纯化器，按杂质的类型采取化学方法或冷冻方法或物理吸附方法去除杂质，达到气体纯化的目的。

冷冻干燥器 refrigerant drier　由低温装置和抽气机组成，能使容器内的水降到三相点温度以下，并在真空中升华而达到干燥的设备。由物质的 *P-T* 状态图上可见，当温度低于临界温度 T_c 时，出现气液共存的区域，再降低温度时，出现固、液、气共存的点称为三相点，该温度称为三相点温度 T_{tri}，水的三相点温度为 273.16K，当温度继续下降时，则成为固、气共存状态，此时用抽气机抽去气体，为了保持状态的平衡，物质就部分地由固态直接变为气态。这样的干燥过程避免了传统的加热蒸发干燥的途径，能保持药品中的活性成分，也能保持食品的新鲜状态，广泛地为医药和食品工业所应用。

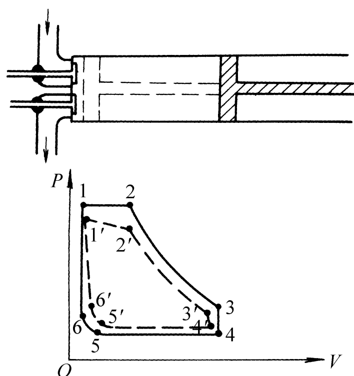


活塞式膨胀机 reciprocating expansion engine

膨胀机是用来使气体膨胀输出外功以产生冷量的机器。其工作原理是将压缩气体的位能转变为机械功。因此，膨胀机也是一种气体发动机，所不同的是以使气体冷却获得冷量为

主,利用机械功是次要的。

活塞式膨胀机是利用气体在气缸中膨胀对外做功,通过曲柄连杆机构传给曲轴。调节活塞式膨胀机产生冷量的方法有改变膨胀机转速,改变充气度和节流调节三种,最常用的是节流调节方法。



活塞式膨胀机的理论示功见图所示 1 ⟶2 ⟶3 ⟶4 ⟶5 ⟶6。其工作循环由进气(1→2):气缸内以 P_1 压力气体充气,相应于点 2 关闭进气阀;膨胀(2→3):气体从 P_1 压力膨胀到 P_3 压力,点 3 时开排气阀,气体开始从气缸内排出;流出(3→4):气体从 P_3 压力膨胀到 P_4 压力,并从气缸内流出,此时气体膨胀不仅在气缸中进行,而且还在膨胀机外面的管道、设备中进行;排气(4→5):气体由气缸内排出,点 5 时关闭排气阀;压缩(5→6):排气阀关闭后残留在气缸内的气体压缩,气体从 P_5 压力升高到 P_6 压力,点 6 时开启进气阀;以及充气(6→1):气缸余隙容积内充以压缩气体,原有气体从 P_6 压力压缩到 P_1 压力等六个过程组成。考虑到流动损失,内部热交换和外界热流其实际的示功图为 1′⟶2′⟶3′⟶4′⟶5′⟶6′。

透平膨胀机 expansion turbine 是利用压缩气体在通过喷嘴和工作轮时膨胀,推动工作轮回转输出外功,同时本身冷却。林德于 1934 年提出了透平膨胀机制冷的原理,1939 年卡皮查将它用于空气液化取得了成功。

从向心式透平膨胀机来看,当压缩气体由膨胀机进口进入透平膨胀机后,先经过透平膨胀机的喷嘴加速与导向,然后气体以很高的切向速度和很低的径向速度进入透平机转子通道,当气体经过转子时,气体将自己的动能传给转子,然后以很低的速度从转子中心排出口离开。当气体通过转子时,同时受到一个很强的离心力,因此当气体越过这个逐渐减小的离心力场时,气体又进行一次补充膨胀,这膨胀能也传给了转子。

讨论透平膨胀机的热力学过程,假设 P、V、u、T 分别表示气体的压力、摩尔体积、摩尔内能和温度,而用脚标 1,2,3 表示气体进入透平的高压气状态、离开喷嘴进入转子时的高速气体状态以及离开转子中心时的排出气体的状态,v 是气体离开喷嘴时的速度。根据能量守恒可得:$u_1+P_1V_1=u_2+P_2V_2+\frac{1}{2}Mv^2$,其中 M 为气体的摩尔质量,亦即 $h_1-h_2=\frac{1}{2}Mv^2$,其中 h 为摩尔焓。又因 $\Delta h=c_p\Delta T$,可得,

$$c_p(T_1-T_2)=\frac{1}{2}Mv^2 \qquad (1)$$

气体进入转子的能量等于气体离开转子的能量加上对转子做的功。所以有

$$u_2+P_2V_2+\frac{1}{2}Mv^2$$

$$=u_3+P_3V_3+\frac{1}{2}Mv^2+\frac{1}{2}Mv^2$$

上式右边第三项为转子吸收并传给转轴的气体运动的动能,右边第四项为气体克服径向离心力所作的功,此功也传给了转轴,因此可得

$$c_p(T_2-T_3)=\frac{1}{2}Mv^2 \qquad (2)$$

联立(1),(2)得

$$c_p(T_1-T_3)=Mv^2 \qquad (3)$$

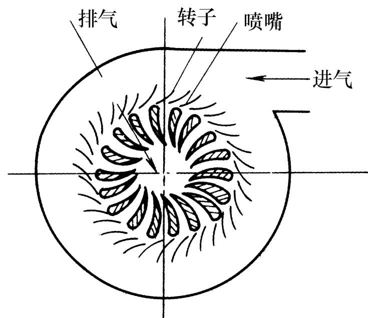
所以通过透平膨胀机后气体的温度为 $T_3=T_1-\frac{Mv^2}{c_p}$按绝热过程又可计算得

$$T_3=T_1\left(\frac{P_3}{P_1}\right)^{\frac{c_p-c_v}{c_p}} \qquad (4)$$

从(3)、(4)两式可得到透平膨胀机的温降及膨胀比与气体运动速度之间的关系。

从式(3)可见透平膨胀机的转速越大,温降

就越大。一般要求每分钟数万转到10万转以上,在应用了气体轴承以后,得到了很好的发展。



压缩机 compression engine　在制冷循环中必不可少的一步是使工作气体升压,然后才能经由等焓或等熵膨胀后产生降温的效果。压缩机就是用来提高气体压力的机器,是制冷机中不可缺少的设备之一。

按照压缩气体的方式不同,压缩机分为容积式和透平式两大类。

容积式压缩机是利用改变气体所占封闭空间的容积,使气体分子接近,即使单位容积内分子数增加,来达到提高压力的目的。其特点是气体的压缩和压出是通过压缩室容积的周期性反复缩小而实现的。有活塞式、回转式和膜式三种。

透平式压缩机是利用气体惯性力,在减速运动中,气流中后面的分子挤紧前面滞止下来的分子,而使分子间相接近,达到提高气体压力的目的,其特点是气流与压缩过程是连续的,它有轴流式,离心式(径向式)和对角线式三种。

压缩机的理论耗功为:

等温压缩

$$W = P_1 V_1 \ln \frac{P_2}{P_1}$$

绝热压缩

$$W = \frac{K}{K-1} P_1 V_1 \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{K-1}{K}} - 1 \right]$$

多变压缩

$$W = \frac{n}{n-1} P_1 V_1 \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right]$$

其中 V_1 为吸入体积流量,P_1 为吸入压力,P_2 为排出压力,K 为绝热指数,n 为多变指数。

流量计 flowmeter　测量单位时间流过的液体量的计量仪器。用在低温流体的流量计有节流式和涡流式流量计两种。

节流式流量计是根据流体通过节流装置时,在收缩截面处流速提高、位能降低,在节流装置的前后形成静压差,此压差随流体流量的变化而变化的原理,通过测量静压差来决定流体流量。

涡轮流量计是由涡轮流量变送器、前置放大器、指示或累计式显示仪表组成。涡轮流量变送器是以动量矩为原理的速度式仪表,由涡轮、导流架、壳体和磁电感应转换器组成。涡轮安装在摩擦很小的两轴承之间,带永久磁铁的感应线圈装在壳体上。当流体流过变送器时,即推动涡轮旋转,周期性地切割磁力线,线圈即产生周期性变化的电讯号。此讯号的频率与涡轮的转速成正比,而涡轮的转速在测量范围内又和流量的大小成正比,最后经过单独的标定即可由频率转换为流量。

温标 temperature scale　温度的数值表示称为温标。构成一套温标要有温度的固定点、固定点之间的扦补公式以及温度计这三个必要条件。温标中以热力学温标为最科学,其他温标以热力学温标为标准进行修正和靠拢,在实际的测温中国际计量委员会的温度咨询委员会对温标作了严格的规定,在世界各国统一使用1990国际温标。

温度的固定点 fixed points of temperature　一些纯物质的相变点,它的温度是不变的,可利用这个特性来作为固定的温度点。在低温下IPTS-68,EPT-76,ITS-90都规定了一些固定点,利用这些固定点再加上扦补公式就可以对温度计进行分度。在低温下的固定点有以下一些:

水三相点　273.16K

平衡氢三相点　13.8033K

氙三相点　161.404K

Nb 超导转变点 9.2880K

氖三相点 115.776K

Pb 超导转变点 7.1997K

氩三相点 83.8058K

In 超导转变点 3.4145K

氮三相点 63.1504K

Al 超导转变点 1.1810K

氧三相点 54.3584K

Zn 超导转变点 0.8500K

氖三相点 24.5591K

Cd 超导转变点 0.5200K

氦蒸气压温标 helium vapor-pressure scale 利用氦的蒸气压与温度的对应关系作为低温的温度标准。由国际计量委员会的温度咨询委员会的多年工作以及各国计量部门的协议通过，在国际上一致应用的 1990 国际温标，ITS-90 规定了，在 0.65～5.0K 的温区由 ^{3}He 和 ^{4}He 蒸气压与温度 T 的关系来定义，其 T-P 关系由下式决定：

$$T_{90}/K = A_0 + \sum_{i=1}^{9} A_i \cdot [(\ln P/Pa - B)/C]^i$$

在 0.65～3.2K，采用 ^{3}He 蒸气压，在 1.25～2.1768K 及 2.1768～5.0K，采用 ^{4}He 蒸气压，其中除掉 2.1768K 的 λ 点。温度咨询委员会同时给出了以上多项式的 12 个参数。

	^{3}He 0.65～3.2K	^{4}He 1.25～2.1768K	^{4}He 2.1768～5.0K
A_0	1.053447	1.392408	3.146631
A_1	0.980106	0.527163	1.357655
A_2	0.676380	0.166756	0.413923
A_3	0.372692	0.050988	0.091159
A_4	0.151656	0.026514	0.016349
A_5	−0.002263	0.001975	0.001826
A_6	0.006596	−0.017976	−0.004325
A_7	0.088966	0.005409	−0.004973
A_8	−0.004770	0.013259	0
A_9	−0.054943	0	0
B	7.3	5.6	10.3
C	4.3	2.9	1.9

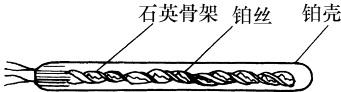
铂电阻温度计 platinum resistance thermometer 金属的内部导电过程较复杂，其电阻率简单的可由两部分组成 $\rho = \rho_1(T) + \rho_r$，$\rho_1(T)$是由晶格格点的热运动所引起，它与温度有关，称为声子电阻率。ρ_r 是由杂质和晶体缺陷所引起，称为剩余电阻率，与温度无关。利用金属这一电阻率与温度的关系，可以做成温度计，用电阻的大小来表示温度。金属铂是理想的温度计材料，它易提纯，易加工，有很好的物理和化学的稳定性，国际温度咨询委员会把它作为ITS-90 从 13.8033K～961.78℃温区的标准温度计，且对它的纯度要求为其电阻比 $W(29.7646℃) \geqslant 1.11807$ 或 $W(-38.8344℃) \leqslant 0.844235$，其中 $W = R(T_{90})/R(273.19\text{K})$，并规定了在水三相点温度以下的参考函数为

$$\ln[W_r(T_{90})] = A_0 + \sum_{i=1}^{12} A_i \{[\ln(T_{90}/273.16) + 1.5]/1.5\}^i$$

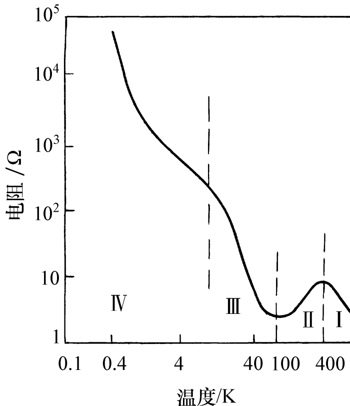
其偏差函数为

$$W(T_{90})-W_r(T_{90})=$$
$$a[W(T_{90})-1]+b[W(T_{90})-1]^2$$
$$+\sum_{i=1}^{5}C_i[\ln W(T_{90})]^{i+2}$$

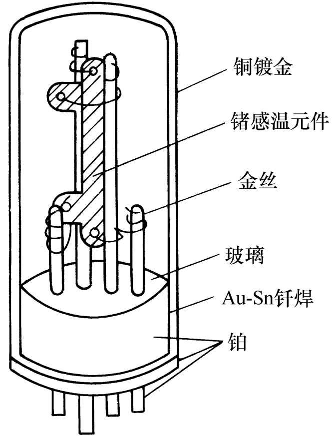
并且给出了温度的固定点和所有的上两式的参数。这样制作的铂电阻温度计即是一支非常好的温度计量器具。



锗电阻温度计 germanium resistance thermometer 半导体在一定温度范围内其电阻具有负温度系数，随温度降低而增大。因此，用半导体材料做成的温度计，可以弥补金属电阻温度计在低温温区灵敏度降低的不足。锗电阻温度计是由掺杂锗单晶制成。高纯锗主掺镓，补偿锑则有如图之温度电阻曲线。在Ⅰ区



中，半导体本征激发占优，温度越低本征激发所产生的载流子也少，电阻越大。在Ⅱ和Ⅲ区主要是杂质激发所产生的载流子参与导电过程。在Ⅱ区杂质已全部激发，温度降低时由于晶格振动对载流子的散射作用减弱，所以电阻减小。在Ⅲ区中杂质激发所产生的载流子随温度的降低而减少，电阻增加。在Ⅳ区，10K以下本征与杂质激发都不能进行，几乎没有自由载流子，这时仅为杂质能级电导，在电场下形成微弱的电流，温度低电阻高。由此利用Ⅲ、Ⅳ两区，将锗电阻分度，即成锗电阻温度计。



碳电阻温度计 carbon resistance thermometer 碳电阻是由微小的石墨颗粒聚合而成。碳电阻的电阻值具有负的电阻温度系数，温度越低，电阻值越高，适用于液氦温区的测温。它灵敏度高、尺寸小，对环境参数(磁场、辐照、压力等)不敏感，它的电阻温度关系曲线光滑，可用较简单的公式来分度，一般可用

$$\frac{1}{T}=\sum_j A_j(\log R)^j$$

的表达式。碳电阻在测温时，应尽可能不超过90K，否则会影响复现性，需要重新校准，即在一个温度点上重新测定，然后调整其 R-T 关系式中的一个常数即成。碳电阻的热导较差，测温时要防止工作电流引起的自热效应，测量电流应尽可能的小，一般不超过 100μA，在改变温度后要有几秒钟的等待时间。

碳玻璃电阻温度计 carbon glass resistance thermometer 它是碳电阻温度计的一种改进型。从硼硅碱性玻璃中除去富硼相，留下直径约为 30nm 的硅酸盐球面状的材料，随机分布成 3～4nm 的分离孔隙，然后在间隙中充以高纯碳，形成无定形的碳纤维，最后切割成约

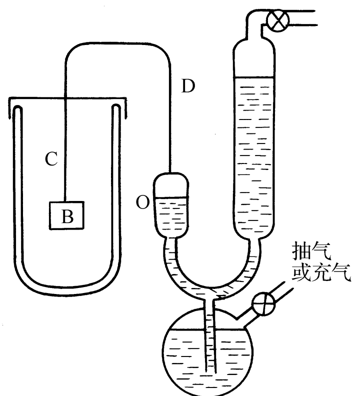
5mm×2mm×1mm 片状物，引上电极，在100℃下加热24小时以除去水汽和其他气体，然后在氦气氛中封入铂外壳。其灵敏度是温度的单值函数，其温度的分度公式为：

$$R=\sum_{i=1}^{3}A_iT^{a_i}e^{-\beta_i/T}$$

气体温度计 gas thermometer 利用理想气体的状态方程 $PV=nRT$ 的原理制成的温度计。它可以用压力的变化或体积的变化来测定温度，它实现的是热力学温标。

从状态方程来看，对一定量的气体，即 n 为常数时，当体积一定，其压强与热力学温度成正比；当压强恒定，其体积与热力学温度成正比，所以可以做一个测温泡加上测压或测体积变化的装置，构成一密闭系统，在系统内充入纯的氦气，即构成一支气体温度计。

压力测量比体积测量容易实现，一般采用定容式气体温度计。其原理图如下，B 是温泡，体积为 V_b，C 是毛细管，处温度梯度中，其横



截面为 $a(x)$，温度分布为 $T(x)$，D 为死体积，其数值为 V_0 处在室温区 T_0，可列以下方程：

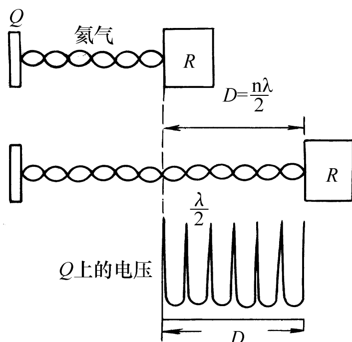
$$\frac{PV_b}{RT}+\frac{P}{R}\int\frac{a(x)}{T(x)}\mathrm{d}x+\frac{PV_0}{RT_0}=\frac{P_0(V_b+V_c+V_0)}{RT_0}$$

P_0 为全系统处在室温时充入气体的压强。忽略 V_c 项可得 $T=\dfrac{T_0P}{\alpha(P_0-P)+P_0}$，$\alpha=\dfrac{V_0}{V_b}$，此即温度计测温公式。经过一定的修正后，它是一次的基准温度计，使用范围宽（3～1400K）、精度高。

声学温度计 acoustic thermometer 利用理想气体中声速的平方与热力学温度成比例的关系来测定热力学温度的温度计称为声学温度计，也称为动态气体温度计。1965年美国国家标准局（NBS）用它建立了2～20K的热力学温标。

在绝热的情况下，声波在气体中传播时遵守 $C^2=\dfrac{E}{\rho}=-\dfrac{V^2}{m}\left(\dfrac{\partial P}{\partial V}\right)_S=-\dfrac{C_p}{C_v}\dfrac{V^2}{m}\left(\dfrac{\partial P}{\partial V}\right)_T$，其中 $E=-V\left(\dfrac{\partial P}{\partial V}\right)_S$ 为绝热体积弹性模量，ρ 为气体密度，作为理想气体则有 $\left(\dfrac{\partial P}{\partial V}\right)_T=-nRT\dfrac{1}{V^2}$，如果工作气体采用单原子分子He，则 $\dfrac{C_p}{C_v}=\dfrac{5}{3}$，于是可得 $C^2=\dfrac{5}{3}\dfrac{RT}{M}$，其中 M 为气体摩尔质量，只要测得声速 C，即可求得热力学温度 T。

声速的测量可以用一石英晶体作为换能器 Q，在外电路以其谐振频率 ν 来激励出声波，在传输管的另一可移动的端面 R 处被反射，当传输距离 D 为半波长的整数倍时，形成驻波，



此时在石英晶体中电压出现峰值，这时可调节反射器 R，使距离移长 D，出现 n 个峰值电压，则有 $C=\nu\lambda=2\nu\dfrac{D}{n}$，于是温度 T 就可测得。

磁温度计 magnetic thermometer 顺磁晶体

在一定的温区内其磁化率服从简单的居里定律 $x=\frac{C}{T}$，当 $T\to E_1/k$ 时（E_1 为第一激发态能量）将出现偏差。在低温下，由于晶体场分裂及离子间相互作用的影响也将出现偏差，一般可写成 $x=x_0+\frac{C}{T+\Delta+\frac{\delta}{T}}$，其中 $\Delta=\left(\frac{4}{3}\pi-\varepsilon\right)C$，ε 为退磁因子，$C$ 取决于原子的基态与温度无关，δ 是晶体场的影响，对大多数过渡族元素 E_1 相当高则 δ 项可忽略。在选择磁温度计工质时，将其加工成球形或用粉末压成立方块，则 $\varepsilon=\frac{4}{3}\pi$，于是 $\Delta=0$。在具体使用时可用 4 个温度固定点以定出 x_0, C, Δ, δ 等四个参数，以后只要测量磁化率 x 就可算得热力学温度 T。

噪声温度计 noise thermometer 它是一种测量热力学温度的基准温度计。带电载流子的无规则布朗运动，在热平衡的电阻两端产生涨落的电动势，称为热激发的噪声，该噪声电压 $\langle V_n^2\rangle$ 当 $kT\gg h\nu$ 时可表示为

$$\langle V_n^2\rangle=4RkT\Delta\nu$$

其中 k 为玻尔兹曼常数，$\Delta\nu$ 为该涨落电压的频带宽度。通常在低温下 $\langle V_n^2\rangle$ 很小，一般放大器的输入噪声大于 $\langle V_n^2\rangle$ 且是可变的，影响了测量。但 SQUID 问世后，这一测量已成为可能，约瑟夫森结辐射的频率与通过结的电压有关，电压涨落将影响结输出的微波频率，只要通过频率的测量就可决定 $\langle V_n^2\rangle$，而频率的测量精度是非常高的，这决定了噪声温度计可以精确地测定热力学温度 T。

介电常数温度计 dielectric constant thermometer 一种以气体的介电常数和密度之间的关系为依据与理想气体的状态方程联立，可以由气体的介电常数与温度的关系来测量热力学温度。这种温度计作为内插和基准温度计都很有前途。

根据 Clausius-Mossotti 公式 $\frac{\varepsilon_r-1}{\varepsilon_r+2}=\frac{\alpha}{V_m}$，其中 $\varepsilon_r=\varepsilon/\varepsilon_0$ 为相对介电常数、α 是摩尔极化率、V_m 为摩尔体积，此式与 $pV_m=RT$ 联立可得

$$p=\frac{R}{\alpha}\left(\frac{\varepsilon_r-1}{\varepsilon_r+2}\right)T$$

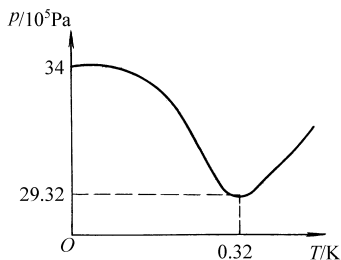
由此可见，只要测得 ε_r 就可以定出温度 T。相对介电常数可由电容器在真空与有介质时的电容量 C_0 和 C 的测量而得到 $\varepsilon_r=\frac{C}{C_0}$，令 $\beta=\frac{C-C_0}{C_0}$，$\mu=\frac{\beta}{\beta+3}$，可解得

$$p=A_1\mu(1+A_2\mu+A_3\mu^2+\cdots)$$

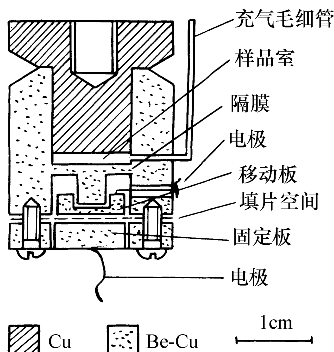
其中 $A_1=\left(\frac{a}{RT}+\frac{K}{3}\right)^{-1}$，气体稀薄时 $\mu\to 0$，所以上式取近似可得 $p=A_1\mu$，作出 p-μ 等温线即可求出斜率 A_1，再有两个温度固定点来定出 a、K，于是由此式即可求得温度。它测的是热力学温度，有很高的精度。

^{3}He 融化压力温度计 ^{3}He melting pressure thermometer 从 ^{3}He 的状态图中可见，当温度降到 0.319K 时出现固、液共存区，$T<0.319$K 时融化曲线呈现 $\frac{dp}{dT}<0$ 的特性。在此温区，p、T 是单调变化的，只要测得压力就知道温度，这就是该温度计的测温原理。它的结构如下：从进口处充入 ^{3}He，当温度降到 0.319K，压力达到 2.932×10^6Pa 时，进气口被固体 ^{3}He 堵死，形成一个密封的充满 ^{3}He 的腔体，温度降低时，部分液 ^{3}He 就转为固 ^{3}He，压力也增高，下端是一个应变的电容器，内部的压强变化可由电容的变化而测得。

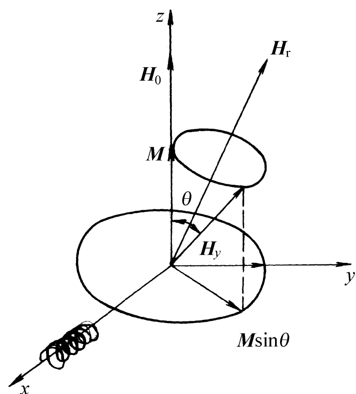
$T(1\times10^{-3}\text{K})$	3	10	14	20	50	100	150	200
$p(1\times10^5\text{Pa})$	34.333	34.0557	33.8954	33.6613	32.6224	31.3159	30.4154	29.8215



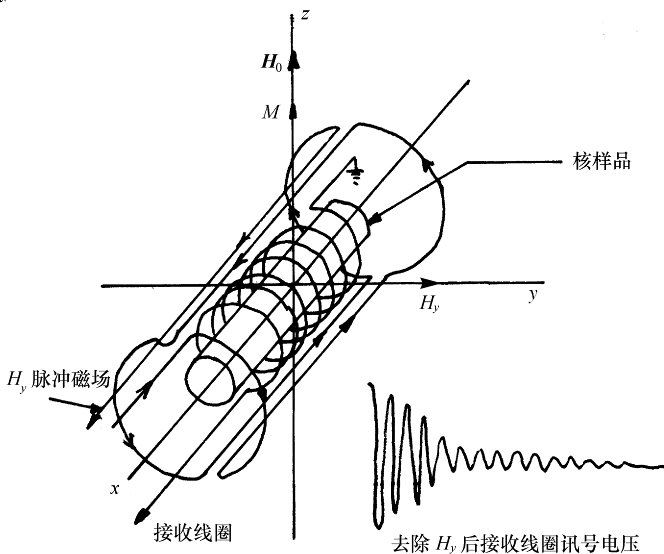
³He 的状态图



核磁共振温度计 nuclear magnetic resonance thermometer 这是通过测量核磁磁化率来确定温度的温度计。在纯金属铜中，核磁矩自发有序温度约为 10^{-7}K，在 $T>10^{-4}$K 时，核磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 随温度的变化遵从居里定律 $x=\frac{C}{T}=\frac{\boldsymbol{M}}{\boldsymbol{H}_0}$，式中 $\boldsymbol{H}_0$ 是外加磁场，可见只要测出 $\boldsymbol{M}$



后即可定出温度 T，从图中显示来看，设外场 $\boldsymbol{H}_0$ 在 z 轴方向，磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 与其同向，如果在 y 轴方向加一脉冲磁场 $\boldsymbol{H}_y$，则合磁场为 $\boldsymbol{H}_r=\boldsymbol{H}_0+\boldsymbol{H}_y$，此时 $\boldsymbol{M}$ 就绕着 $\boldsymbol{H}_r$ 进动，假设 $\boldsymbol{M}$



进动到与 z 轴成 θ 角时，脉冲场退出，则 $\boldsymbol{M}$ 将绕 $\boldsymbol{H}_0$ 进动，其在 xy 平面的投影 $\boldsymbol{M}\sin\theta$ 会在置于 x 轴方向上的接收线圈中感应出正弦电压，由于核自旋之间的相互作用，θ 角将逐渐减小，感应电压呈现出幅度衰减的正弦波形式，其初始幅度 $V=\frac{4\pi e\boldsymbol{H}_0^2 rA\eta N\sin\theta}{\mathrm{T}}\times10^{-8}$伏，其中 A 为接收线圈截面积，N 为接收线圈匝数，η 是待测温体与线圈间磁耦合情况的填充因子，r 是核的旋磁比。但关系式的分子部分全是常数，所以可以通过一个温度固定点而被确定，它是 mK 级的温度计。

传导传热　heat trasfer by conduction　依靠构成物质的粒子(原子、分子或电子)以平衡位置为中心的运动，把热量从物体的高温端传到低温端的传热方式。可在固体与静止的流体中发生。热传导的基本公式为 $\boldsymbol{q}=-\lambda\cdot\nabla T$，传热的方向与温度梯度一致，但方向相反，大小与温度梯度成比例，比例系数为 λ，称为热导率。

辐射传热　heat transfer by radiation　温度高于绝对零度的物体内的带电粒子振动或转动时向空间辐射出电磁波，而另一物体接受到电磁波，并把它转变为热能，这样就形成了辐射传热。

温度为 T、表面积为 A 的物体在单位时间内的辐射的热量 $q=\sigma\varepsilon AT^4$，其中 ε 为发射率，与物体的材料和它的表面状况有关，σ 是斯特藩-玻尔兹曼常数，$\sigma=56.7\times10^{-9}\mathrm{W\cdot m^{-2}\cdot K^{-4}}$。

当一面积为 A_1、温度为 T_1 的物体被另一温度为 T_2 的物体包围时，两物体之间的辐射传热为 $q=\sigma A_1F_{1-2}\cdot(T_2^4-T_1^4)$。

对流传热　heat transfer by convection　组成流体的物质微粒以集团的形式从能量高的热端移动到能量低的冷端而形成的传热。其中由于温度不同而产生密度的差异，在重力场中形成的对流传热为自然对流传热，如在外力的作用下形成物质的流动产生的传热称为受迫对流传热。

卡皮查热阻　Kapitza heat resistance　固体和液氦之间，以及金属和电介质之间及两电介质之间(紧密接触情况下)的界面热阻称为卡皮查热阻。在以上界面之间的热导主要靠声子传热，声子通过液氦到达固液界面时，发生反射或折射，遵守 $\sin\alpha_l/\sin\alpha_s=v_l/v_s$，由于固体中的声速 $\boldsymbol{v}_s$ 比液体中声速 $\boldsymbol{v}_l$ 大得多，所以临界角 α_l^c 就很小，即只有很小的立体角范围内的声子有可能进入固体，同时固体和液氦的密度相差很大，声速相差也很大造成失匹配。因此，只有能量小于 10^{-5}的一部分声子可以进入固体，所传输的能量也就很小了，在界面上传输能量的减小即出现了卡皮查热阻。

高真空绝热　high vacuum insulation　冷热两个表面之间用抽成高真空的方法而达到绝热的效果。当气体的平均自由程 $l\ll d$(两表面之间距离)时，气体的热导率 $\lambda=\frac{1}{3}\rho\bar{\boldsymbol{v}}lc_v$，式中 $\bar{\boldsymbol{v}}$ 为气体的热运动平均速度，ρ 是气体密度，c_v 是定容比热，其中 $\rho\propto p$，$l\propto\frac{1}{p}$，所以 λ 与气体压强无关。当 $l\gg d$ 时，气体分子在冷热表面之间直接飞行而进行热量的传递，其传热与气体压强成正比，所以高真空绝热，其真空度要好于 10^{-5}托才有明显的效果。

粉末绝热　powder insulation　在冷热表面之间用低导热系数的小颗粒状固体粉末充填后达到绝热的效果。在冷热两表面之间由于经过多个低热导的颗粒，其导热的总热阻为多个颗粒热阻加多个界面热阻之和，辐射传热被多个表面反射降得很低，在室温下的空气，在颗粒度为 1mm 以下的间隙中对流传热也消失了。这样就形成了一个良好的绝热条件。

泡沫材料绝热　foam insulation　用发泡的聚苯乙烯作为绝热材料的绝热方式，它具有粉末绝热的同等绝热原理，它的热导率在 $10^{-1}\sim10^{-2}\mathrm{mW\cdot cm^{-1}\cdot K^{-1}}$，它广泛地使用在如家用冰箱以及需要绝热的各种管道及有关设备上，具有使用方便、材料轻、可以现场成型等优点。

多层绝热　multilayer insulation　在高真空绝热的情况下，剩余气体的传热已降到很小了，此时传热的主要途径是辐射，辐射传热相当于剩余气体传热的 150 倍。把 n 层($n=150$)的真空镀铝涤纶薄膜放置在冷热表面之间，其辐射传热将减小到$\frac{1}{n+1}$，这种绝热形式称为多层

绝热，有极好的绝热效果。

多屏绝热 multishield insulation 是杜瓦容器所采用的一种绝热的形式。在高真空的杜瓦容器中，辐射传热已变为主要的传热途径，它的传热量约为剩余气体传热的150倍。辐射传热的大小与两表面温度的四次方的差成正比，所以降低热表面的温度是非常有利的。假设容器中的低温液体单位时间有 m 克的液体蒸发成为同样温度的气体，这些气体在经过颈管时与颈管热交换，在颈管上形成温度梯度，下端为液体的沸点，上端为室温。这时如在杜瓦的内容器外部装上几个金属屏，屏的上端依次固定在颈管上，使其有很好的热接触，形成不同温度的多个防辐射屏。通过计算可得无屏与有 n 个屏的单位时间蒸发量之比为

$$\frac{m_o}{m_n}=\frac{1}{n+1}\left[\frac{S}{(1+S)^{\frac{1}{n+1}}-1}\right],$$

其中 S 为液体的显热/潜热，对液氦有：

屏数(n)	0	1	2	3	4	7	10	20	50	∞
$\frac{m_o}{m_n}$	1	4.5	7.0	8.6	10.6	11.8	12.5	13.8	14.7	15.3

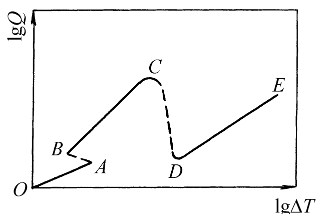
杜瓦容器 Dewar vessel 1892年由法国科学家杜瓦首先提出并制成，由双层壁构成的容器。在壁间抽成高真空以减小气体的传热，双层壁相对的两个表面镀银或抛光以降低辐射率，从而使辐射传热尽可能地减小，内壁通向室温部分的颈管用热传导差的材料，如薄壁的不锈钢或者用非金属材料制成以减少从室温经颈管材料的固体导热而传入的热量，随着绝热技术的发展，杜瓦容器又增加了多层绝热与多屏绝热的形式，使杜瓦容器的漏热进一步降低。

热桥 heat bridge 外界进入低温部分的热流，除通过绝热体传导外，还有一部分是通过绝热空间的连接件，如管道、吊杆、支承等传导。这些连接件称为热桥。通过热桥传导的热流比例，随绝热体的绝热效率的提高而增大，在低温容器中可高达总热流的30%～50%，甚至更高。因此在低温绝热中，除设法减小通过绝热体的热流外，还需设法减小通过热桥传导的热流。

为了减少热桥导热，在可能的范围内增加管道的长度、减小管壁的厚度；在材料的选用上，用导热系数小和选用应力高，即[σ]/λ较大的材料，如不锈钢、尼龙、涤纶等。在支承上还可以采用多层叠片的方法，它可增加金属材料的热阻，有可能比整块金属大几十倍，用以减小漏热是很有利的。

防辐射屏 antiradiation shield 在绝热技术中利用低辐射率的材料做成的表面。如镀银后抛光的表面、真空镀铝的涤纶薄膜等，它们对辐射的吸收小、反射大，可以去除大部分的辐射热，起到防辐射传热的效果。如果在冷热表面之间有一个低温源时也可以用导热好的材料做成屏接到低温源上，用以吸收来自高温表面的辐射热，从而大大减小了向低温表面的辐射传热。

核沸腾 nuclear boiling 是指发生在固体-液体界面上的一种传热形式。单位界面、单位时间内从固体表面传给液体的热量 Q，起初仅使液体形成自然对流，这时的传热系数很小，当固体与液体的温差 ΔT 进一步加大时，在固体表面上会形成气泡，气泡增大到一定尺度就跃离固体表面，增加了液体的扰动，这时传热量大大增加，ΔT 突然减小，这样就开始形成了界面上的核沸腾现象。在图中由 BC 段来描述。其最大热流与液体性质有关，对液氮约为

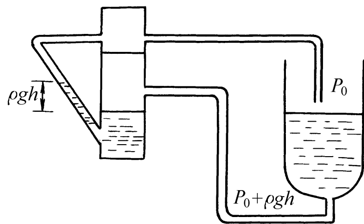


20 W/cm^2,对液氢约为 8 W/cm^2,对液氦约为 0.6 W/cm^2。

膜沸腾 film boiling 是指发生在固体-液体界面上的又一种传热形式,在核沸腾的情况下,继续加热固体,这时固体表面的气泡大量生成,形成很高的密度,最后气泡连成一片而成为一层气膜,固体表面被气膜所包围不与液体直接接触,然后整个气膜脱离界面而形成沸腾膜,这时的界面传热突然下降,以上图的 DE 段来描述。在这区域加热的固体表面与液体之间的温差很大,会导致固体装置的过热而烧损。在实际工作中应避免膜沸腾的形成。

两相流 two-phases flow 低温流体在管道中流动时,不断地与外界进行热交换,在吸收热量以后,一部分液体就变成气体。此时气态和液态混合在一起的流动称为两相流。按照热力学参数的不同它将呈现出气泡流、环流、塞流等形态。

液压式液面计 liquid pressure level gauge 金属的杜瓦容器、低温的液化器、贮槽以及槽车等用来观察内部液面高度的装置为液面计。盛有密度为 ρ、高度为 h 的液体的容器底部的压强等于液体表面的压强 P_0 加上液体的静压强 ρgh,将此表面和底部的压强分别用毛细管引出到另一盛常温液体的指示容器的两端,在这压力差的作用下指示容器的液面出现一高度差,通过校正即可指示出低温容器中的液面高度。



电容式液面计 capacitance level gauge 同轴管式电容插入低温液体中,其浸入液体部分高度为 h_x,总高度为 h_0,由于液态和气态的介电常数不同,分别为 ε_L 和 ε_G,电容管处于气体中和部分浸入液体时的电容量也不同,分别为 C_G 和 C_x,可得电容的相对变化量$(C_x-C_G)/C_G=\dfrac{\Delta C_G}{C_G}=\dfrac{\varepsilon_L-\varepsilon_G}{\varepsilon_G}\cdot\dfrac{h_x}{h_0}$,可见液面高度 $h_x=\left[\dfrac{\varepsilon_G}{\varepsilon_L-\varepsilon_G}\cdot\dfrac{h_0}{C_G}\right]\cdot\Delta C_G$,括号内为常数。这样的管式电容器,只要测出当它浸入液体时的电容变化量,然后代入该物质的气态与液态的介电常数值,即可测得液面高度,其灵敏度取决于$(\varepsilon_L-\varepsilon_G)/\varepsilon_G$ 的大小,所以它对液氮液面的测量灵敏度大于液氢和液氦。

热声振荡液面计 thermal acoustic oscillation level gauge 一根细金属管上部封闭,把它做成一喇叭口,口上蒙一橡胶薄膜(或金属薄膜),另一端开口。当上端处于室温,下端接近低温液体时,由于低温气体不断进入开口的管子向上运动到热端,受热膨胀而形成纵向的振荡称之为热声振荡,在开口端经过低温液体时,可在喇叭口的振荡膜上感受到振荡有一个突变,用它可以测得液氢或液氦的液面高度。

超导液面计 superconductive level gauge 利用一根超导转变温度略高于氦沸点的超导线,将它与液面垂直放置,在上端绕一组加热丝,在超导丝两端加一恒定电流,再测出两端的电压,可求出超导线的电阻,该电阻为 R_G+R_L 之和,由于浸入液氦部分超导线是处在超导态,电阻 $R_L=0$,即可由测得的 R_G 来定出液面的高度 $h=\left[\dfrac{R_0-R_G}{R_0}\right]\cdot h_0$,其中 h_0、R_0 为超导线的长度和正常态时的总电阻。为了使超导线处于液面上的部分保持正常态,在它的上部绕一小的加热器。考虑到尽可能的减小它的热量输入而引起液氦的损耗,可以只是在测量时才加热,不测量时就断开加热器的方法来解决。此类液面计只能测液氦的液面。

正氢和仲氢 ortho-hydrogen and para-hydrogen 是双原子分子氢的两种量子态。它有两个质子,质子是费米子,具有半整数的自旋,氢分子中两个质子自旋平行的称为正氢,它可以取两自旋向上、向下或垂直纵轴,所以有三种状态,而两质子自旋反平行的称为仲氢,它只有一种状态。

正常氢和平衡氢 normal hydrogen and equilibrium hydrogen 按量子力学原理,费米子体

系的波函数在交换粒子时一定是反对称的，所以它的自旋部分平行，则空间部分波函数为反对称，反之亦然。对正氢两质子自旋平行，空间波函数是反对称，所以轨道量子数 l 只能是奇数，则基态 $l=1$。对仲氢两质子自旋反平行，则空间波函数对称，其轨道量子数 l 是偶数，则基态 $l=0$。所以仲氢基态能量比正氢低，在温度较高时，正氢三重态与仲氢单态的出现为随机的概率，它的正仲比为 3∶1，这种氢称为正常氢。当温度降低时，具有高能量基态的正氢自发地向低能态的仲氢转化，直到在这温度下不再转化时，就称为在这温度下的平衡氢。在一般情况下正仲氢的转换是很缓慢的，约几天时间才能使原子核自旋重新排列同时放出转化热，这转化热大于液氢的汽化潜热，使得液氢难以贮存，所以必须在液化的同时加催化剂 $Fe(OH)_3$ 促使它转化，使转化热被液化器所带走。在液氮温度下平衡氢的正、仲比约为 1∶1，在液氢温度下约为 0.21%∶99.79%。

热开关 thermal switch 指能够控制两个物体之间热接触或热分离的装置，一般有以下四种：

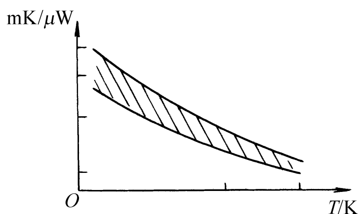
（1）气体开关：两个未接触的物体，如果它们处在高真空的环境，彼此传热极差，是一种热分离的状态，在充入少量的氦气后，通过氦气的传热，两物体之间实现了热接触，从而起到了热开关的作用。

（2）机械开关：有钳式和平板式两种。用和 A 物体热连接的钳子夹住 B 物体时就热连接，钳子松开时就热分离。平板式可用波纹管或威尔逊接头的伸缩使与 A 物体热连接的平板与 B 物体热连接或分离。为了减少接触时的热阻，在接触处应焊上银、黄金或铜等高热导的金属板。

（3）超导开关：利用超导材料的超导态与正常态的热导差而制成的热开关。正常态热导 λ_n 正比于 T，超导态热导 λ_s 正比于 T^3，所以 λ_n/λ_s 正比于 T^{-2}，热导比在 0.1K 以下可达 $10^3 \sim 10^5$。其正常与超导态之间的转换可用一小磁体来实现。在低温下材料处于超导态，加上磁场时它就转变为正常态，所以可以用磁场来控制热开关的通与断，即 A、B 两物体通过一超导材料连接在一起，无磁场时，材料热导率小是热开路。加上磁场，材料失超变为正常态，热导率加大了几个量级成为热通路。

（4）磁热开关：利用有些材料如 Be、Ga 等的热流磁场效应，也即在外场的作用下，这些材料的热导小，无外场时的热导大。所以可以用磁场来控制热通路或断路。例如高纯的 Be 单晶在 $T \leqslant 20$K 时，$H=6$kOe，其热导比 $\lambda(0)/\lambda(H) > 10^2$，这种热开关在温度升高后其声子运载的热流凌驾于载流子运送的热流之上，这时 λ 对 $\boldsymbol{H}$ 时就不敏感了。所以这种热开关在 $T \geqslant 100$K 时就不能使用。

自热效应 selfheat effect 在低温温度测量中，锗电阻温度计和碳电阻温度计具有负的电阻温度系数，也即温度越低电阻越高，为了精确测量阻值，采用四引线法给电阻通一电流，再通过测量电阻两端的电压而得到电阻的值。在低温温区，由于负温度系数使得电阻很高则焦耳热也较大，而电阻本身的热导较小，焦耳热不易传走，这样由工作电流引起电阻本身升温而影响了测温精度，这称为自热效应，锗电阻在液氦温区的自热效应约 $10\text{mK}\cdot\mu\text{W}^{-1}$，所以其工作电流应随所测量的温区而变化，在 20K 时可用 100μA，在 1K 温区时应采用 0.5μA。



热锚 thermal anchoring 也称为热沉，在低温恒温器中为了消除从室温处进入样品的测量线带入的热量，在恒温器的外壳上装一小铜柱，让引线在小铜柱上绕几圈以造成很好的热接触而将从室温输入的热量引入低温液池，这装置称为热锚。在用锗电阻温度计测温时，由于温度计与外界所传递的热量 2/3 是通过引线传入，所以温度计的引线与待测温物体应有一个热锚连接，使引线与待测物处于同一温度。

低温恒温器 cryostat 利用低温液体或者气体制冷机，使样品处在恒定的或可按需要变化低温温度的空间，并能对样品进行一种或多种物理量测量的装置。

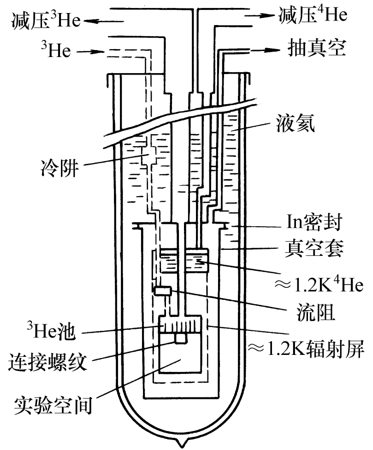
恒温器的结构应根据测量的内容而作专门的考虑，比如测量比热的量热器式恒温器要考虑将漏热尽可能减小到可忽略的量级。而热导率测量的恒温器要考虑有一个热流的通路，能在样品上建立一个恒定的热流。而低温获得的最方便的方法就是将装置浸泡入低温液体。如用液氮可得 77K，如是液氦可得 4.2K。将液体抽气减压，用恒压器恒定液体的蒸气压的方法可取得与该饱和蒸气相对应的温度，即可选定从沸点到三相点之间的任一温度。也可以用抽成高真空的办法使样品空间与低温液池绝热，然后用电加热的方法，通过电子控温仪来控制样品的温度，这样可取得很宽的温度区间，同时能得到很好的温度均匀性与稳定性，对精确测量物理量是必不可少的。

^{3}He 恒温器 ^{3}He cryostat 是一种获得 1K 以下温度的装置。装样品的空间与一液 ^{3}He 池连接在一起，并放入真空室与外液 ^{4}He 池绝热。在真空室内的液 ^{3}He 池上方连一个可以减压到 1K 温度的 ^{4}He 池，当 ^{3}He 气体经过一个流阻缓慢地通过 1K 池时就被液化为 1K 温度的液 ^{3}He，而后进入 ^{3}He 池。这时可对 ^{3}He 池抽气减压就可以获得 0.3K 的低温。

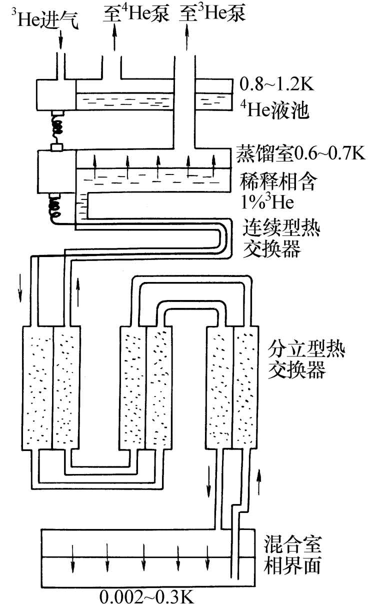
对液 ^{3}He 的减压降温比对液 ^{4}He 的减压降温要容易得多，在 1K 温度下液 ^{3}He 的饱和蒸气压是液 ^{4}He 的 1 千倍左右，又没有液 ^{4}He 在超流态下的爬行膜引起的额外蒸发，而为了限制这蒸发量就要限制膜流需加限流孔，这又影响了抽速的提高。

在 1K 以下的液 ^{3}He 有相当高的冷却能力，在 0.3K 时它的潜热为 26.20J·mol^{-1}，而一般的金属在这温度下的比热已非常小，如铜在 1K 时的比热为 12μJ·g^{-1}·K^{-1}。而 1 升 ^{3}He 气体可得 0.3K 的 1.63ml 的液体，具有 1.16J 的汽化潜热，可把 200kg 铜从 1K 冷却到 0.3K。

稀释制冷机 dilution refrigerator 1951 年 H. London 提出可以用超流 ^{4}He 稀释 ^{3}He 的方法制冷的理论。到 1965 年 P. Das 等人根据这一



理论制成了 ^{3}He-^{4}He 稀释制冷机，目前已达到 2mK 的低温。它可以长时间地维持毫 K 范围的温度，有较大的冷却能力，已成为获得毫 K 温度的最重要的手段和设备。

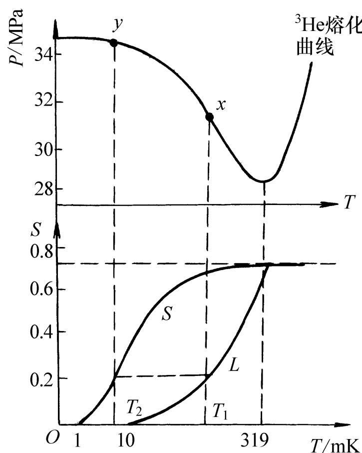


^{3}He，^{4}He 的混合液在 0.86K 以上时，液 ^{3}He 可以以任何比例溶解在液 ^{4}He 中，但是当混合溶液

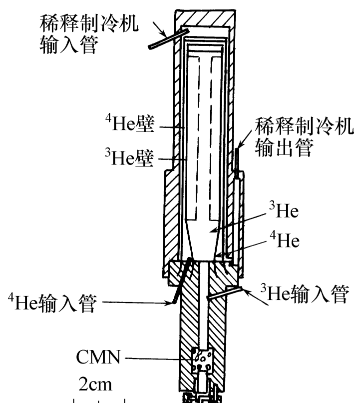
的温度降到 0.86K 以下时,混合液则分离成两相,其中含 ^{3}He 多的相称为浓缩相,而含 ^{3}He 少的相称为稀释相。在低于 0.86K 的任一温度都对应于一定的 ^{3}He 含量的稀释相和浓缩相,并达到相平衡。当从稀释相中取走 ^{3}He 原子时,为了保持两相的平衡,则由浓缩相中的 ^{3}He 通过相界面进入稀释相以补充被移去的 ^{3}He 原子。可以计算得 ^{3}He 在稀释相中的焓和熵比在浓缩相中要大得多。所以这种稀释过程需要吸热,利用这个吸热现象制成了稀释制冷机。

从稀释制冷机的结构图来看,包含相界面的室称做混合室,^{3}He 原子从浓缩相经过相界面进入稀释相要吸热而制冷,使温度降低。包含稀释相的自由表面的室称为蒸馏室,温度维持在 0.6~0.7K。此时 ^{3}He 的饱和蒸气压远高于 ^{4}He 的饱和蒸气压,可以用抽气机抽走,这时浓缩相中的 ^{3}He 原子就不断地通过相界面进入稀释相,抽走的 ^{3}He 经过冷凝再补充到浓缩相中形成循环,使制冷机不断地运行。

波麦兰丘克制冷 Pomeranchuk cooling 1950 年波麦兰丘克提出 ^{3}He 熔化曲线有一最



小值,并确定该值为 0.32K,而且指出在该温度以下液 ^{3}He 的熵比固 ^{3}He 的熵小,沿着熔化曲线对 ^{3}He 的固液混合物进行绝热压缩时可以产生制冷效应。阿努弗拉耶夫在 1965 年用实验证明了这种效应,他从 50mK 压缩 ^{3}He 使温度降到 18mK,后经改进,这种制冷已达到 1mK 的温度范围。目前这种方法一般都在稀释制冷机的基础上使用。将稀释制冷机的混合室



作为波麦兰丘克制冷的预冷级,中间部分是一个 ^{4}He 室,调节 ^{4}He 的压力可以很容易的压缩处于 ^{4}He 内部的充满 ^{3}He 的波麦兰丘克制冷室。从 ^{3}He 的液体及固体的温熵曲线可见在等熵的情况下,通过压缩使液 ^{3}He 转变为固 ^{3}He 时温度就从 $T_1 \to T_2$ 产生了降温的效果。

核去磁 nuclear demagnetization 核磁子比玻尔磁子小 1836 倍,因此核磁矩之间的相互作用要比电子磁矩之间的相互作用微弱得多,所以直到 mK 温度范围,核磁矩仍然是混乱取向的,因此可以用和顺磁盐绝热去磁的类似方法使核系统达到更低的温度,从而达到制冷的目的。

以上方法是 Gorter 在 1934 年,Simon于 1935 年分别提出的,但由于核磁矩太小了,为了使核自旋系统的熵减少与电子自旋系统熵减少达到相同的百分数,则 B_i/T_i 的值要求大 1836 倍。例如当 B_i/T_i=300T/K,我们才可得到铜中熵减少仅为 1.25%,亦即如果初始温度 T_i=10mK,起始磁场 B_i=3 T,这也是核去磁所要求的起始条件。1956 年英国牛津大学第一次完成了核去磁实验,他们第一级用铬钾矾顺磁盐绝热去磁,第二级采用 1500 根直径为 0.1mm 的铜丝,其一端折叠起来,另一端压进铬钾矾中与第一级有良好热接触,最终得到铜

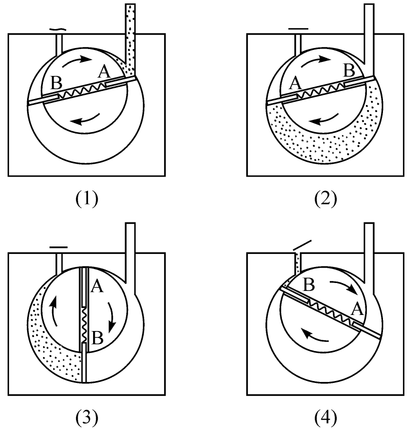
核自旋温度为 16μK。在稀释制冷机问世以后，都把它的混合室作为第一级预冷级。目前已用两级核去磁方法使核系统达到 5×10^{-8}K 的低温。

核冷却 nuclear cooling 在核绝热去磁中，降低的是核系统的温度，称为核冷却。在 1K 以上的温区中核系统、晶格与电子系统相互间的能量交换很快，可以用一个温度值来描述它的冷热程度。在 mK 温区能量交换比较慢了但还可用一个温度值来描述。到了 μK 级温度，这三个系统的温度差异就比较大了，在标示温度时需要给以区分。比如核去磁后，核系统的温度达到 1μK 时，晶格和电子系统温度可停留在 10mK 温度上。

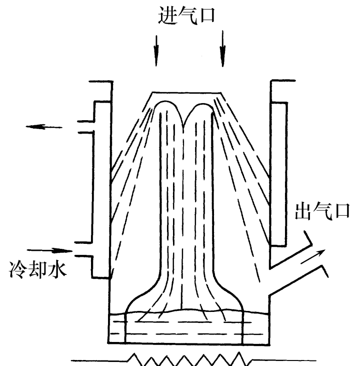
低温泵 cryopump 用低温表面冷凝气体以达到抽气目的的泵称为低温泵。空气是由多种气体混合的混合气体，各组分都有它与温度对应的饱和蒸气压。当温度降到 20K 时，除了氖、氢、氦三种组分外其他组分的饱和蒸气压都降到 10^{-10}托以下，这时可获得 1.2×10^{-2}托的真空。温度降到 4.2K 时，只剩下氦未冷凝，真空度可达 5×10^{-5}托。它可获得没有油气污染的洁净的真空空间。由于泵的冷表面可以直接放入需抽真空的空间，甚至是真空空间的一个组成部分，所以它不需用管道连接，冷凝板的面积可做得很大，具有很大的抽气速率，是一般的扩散泵难以达到的。

机械泵 mechanical pump 应用机械的方法周期性地改变泵内吸气空腔的容积，使被抽容器中气体不断膨胀从而被抽走的泵称为机械真空泵。

目前最通用的旋片式机械泵如图所示，泵内有一圆柱形空腔，空腔上装着进气管道和出气阀门，空腔内有一偏心安装的圆柱形转子，转子的顶端保持与空腔壁相接触，转子上开有两个槽，槽内安放两旋片，旋片间有一弹簧，于是当转子旋转时，两旋片的顶端始终沿着腔的内壁滑动。整个空腔是放在油箱内的。在旋转过程中(1)表示正在吸气；(2)表示吸气截止；(3)表示吸气空腔另一次吸气，排气空腔继续压缩；(4)表示排气空腔内的气体已被压缩到压力大于一个大气压，冲开排气阀而逸出到大气中。这样循环往复，气体就不断的排出而完成了抽气的作用。



扩散泵 diffusion pump 泵中有一股高速定向喷射的蒸气流，气体扩散进入蒸气流便被带往前方，达到抽气目的的泵称为扩散泵，是获得高真空的有效抽机。



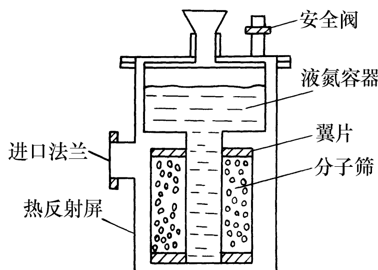
蒸气流由工作液体加热转化而来，工作液体有汞和扩散泵油两类。泵底部为蒸发器，内贮有扩散泵油。上部为进气口，右侧旁管为出气口，在工作时出气口处由机械泵提供前置真空，当油被加热时，产生的油蒸气沿着导流管经伞形喷嘴向下喷出，因喷嘴外面有机械泵提供的真空，故油蒸气流可喷出一长段距离，构成一个向出气口方向运动的射流。射流最后

碰上有冷却水冷却的器壁时，凝结为液体而流回蒸发器形成循环。

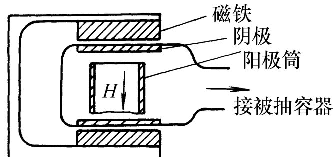
由进气口进入泵内的气体分子，一旦落入蒸气流中，便获得向下运动的动量而往下飞去。由于射流具有高速、高密度及高分子量，故能有效地带走气体分子，所以在射流的界面以内气体分子浓度很小，气体在界面两边形成很大的浓度差，使被抽气体不断地向射流内扩散并被带向出口处。在那里被机械泵抽走，而获得高真空。由计算可得理论上泵的单位面积的抽速为 $S=\frac{\bar{V}}{4}\frac{1}{1+\frac{\bar{V}}{4W}}$，其中 $\bar{V}$ 为气体分子的热运动平均速度，W 为蒸气流分子的速度。

分子筛吸附泵 molecular sieve absorbing pump 利用分子筛在低温下的物理吸附作用进行抽气的泵。

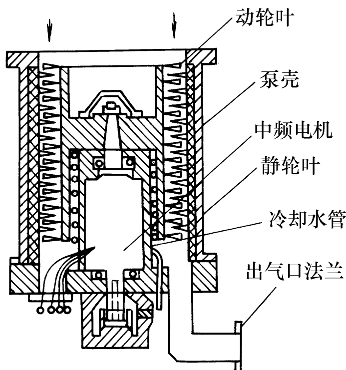
分子筛是一种复杂的硅铝酸物晶体，其通式为$[xM_{\frac{2}{n}}\cdot Al_2O_3\cdot ySiO_2]\cdot mH_2O$，其中 M 为碱金属离子，$n$ 是它的价数。在加热的同时抽空脱去结晶水后，晶体的物理结构没有变化，结果成为具有很大内表面的蜂窝状结构。其表面积一般在 $600m^2g^{-1}$左右，它被液氮冷却到液氮温度时就大量的吸气，产生抽气的效果，可作为其他高真空泵的前级泵，能获得洁净的真空。其结构见图。



溅射离子泵 scattering ion pump 溅射离子泵的结构如图。阳极为一薄壁不锈钢筒，阴极为两块薄钛板，分置阳极两方。阳极、阴极一同装于不锈钢外壳中，整个壳体装于一磁场中，磁力线方向平行于阳极筒轴向，磁通密度约 1000～2000Gs，工作时极间电压为 3～7kV 产生潘宁放电，这是一种在很低压强下仍能自持的放电，所以能运用于高真空和超高真空。放电产生的离子轰击阴极时引起金属钛的溅射，溅射的钛沉积于阳极筒内壁及阴极上离子轰击较少的部位。不断地形成新鲜的活性钛膜，吸附气体分子。同时又连续地掩埋吸附于阳极筒内壁及阴极边角部位的气体分子（对惰性气体也有效），形成泵的抽气作用。真空度可达 10^{-11}Torr 量级。

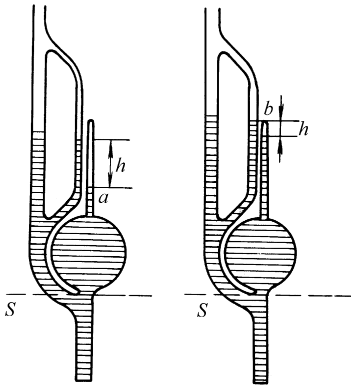


涡轮分子泵 turbine molecular pump 由转子和定子组成，在转子上安有动轮叶，在定子上安有静轮叶，动静轮叶相间安排，在轮叶上装有许多斜置的叶片。按照动量传输的原理，碰撞到高速旋转的动轮叶叶片上的分子，在离开该表面时就获得了与表面速率相近的切向速率。在动轮叶不断的旋转下，形成气体从一方抽到另一方的抽气效果，具有一定的抽速。分子泵正常工作需小于 10^{-2}Torr 的前置压强，经充分除气后的分子泵可获得 10^{-10}Torr 的超高真空。由于动轮叶工作时处于高速旋转状态，所以它不能在磁场中工作。



麦克劳真空计 McLeod vacuum gauge 又称为压缩真空计，是一种绝对真空计，压强数值由它的标尺直接算出。使用时将它与待测真

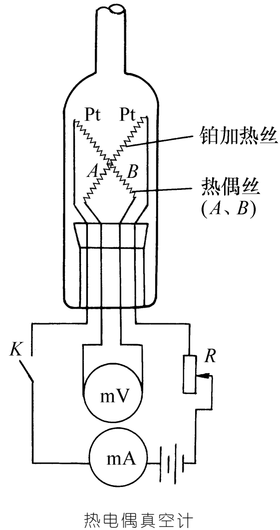
空系统相连，测量真空时抬高水银面到 S，这时压缩腔就被封闭入一定量的气体，其压强为系统的待测压强 P，体积为压缩腔的体积 V_1，当水银面进一步提高时，气体被压缩，其压强为 $P+h$，体积为毛细管中之体积 V_2。V_2 可通过几何测量得到。按玻意耳定律可得 $P=\frac{V_2}{V_1-V_2}h\approx\frac{V_2}{V_1}h$，使每次测量的 V_2 都为一定值，即水银面到 a 线，可得直线刻度法 $P=ch$。若水银面的提升使比较毛细管中的水银面正好到测量毛细管的顶部 b 线，则 $P=\frac{\pi d^2}{4V_1}h^2=Dh^2$，即所为平方刻度法。



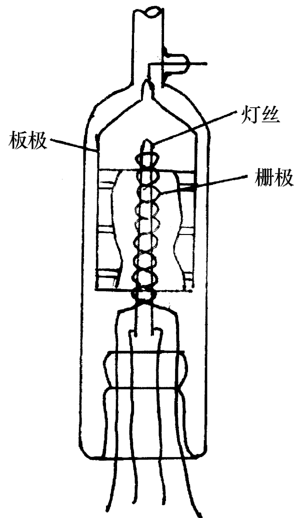
热电偶真空计　thermocouple vacuum gauge　当气体分子平均自由程 λ 大于容器的线度 d 时，它的热传导系数正比于压强 P。将一根金属丝通以恒定的加热电流时，由于气体导走了一部分热量，故当达到热平衡时，金属丝便保持一定的温度。气体的压强高，导走的热量多，平衡温度就低。所以热丝的温度是气体压强的函数，可以通过测量热丝的温度而求得压强的大小。

热偶真空计即是用一热电偶来测量热丝的温度从而得到压强值的真空计。热电偶由两种不同的金属丝连接而成，当两接点温度不同时就产生热电势，温差越大，热电势越高。热电偶的一个接点与热丝相接触，另一接点处于室温，这样经过校正，即可由热电势的值转换为压强的值。它的测压范围为 $1\sim10^{-3}$托。

热阴极电离真空计　thermal cathode ionization vacuum gauge　气体中的电子当它具有足够能量时，一旦与气体分子碰撞就会引起分子电离，产生正离子及电子。电子在一定的飞行路程中与分子的碰撞数正比于气体压强 P，所以产生的正离子数也正比于压强 P，这种利用离子电流的测量而获得真空数值的称为电离真空计。



热电偶真空计



热阴极电离真空计

为了实现以上的过程，需要有一个热阴极来发射电子，一个给电子以能量的加速并收集电子的加速极，以及一个收集离子的收集极。收集极与放大显示电路相连结就构成了真空计。

电离计的测量范围为 10^{-3}～10^{-7}托，在上限处由于电子繁流使得离子流与压强的关系偏离线性的工作区，在下限处由于电子打到加速极产生了轫致辐射，此辐射又在收集极上产生光电子，此光电子的量值相当于在 10^{-8}托下的离子流，所以 10^{-8}托即成了测压的下限。

Semiconductor Physics
半导体物理学

半导体物理学 semiconductor physics 半导体物理学是固体物理学的重要分支,是固体电子学的基础。半导体材料物理性质的研究最早可追溯到1833年,当时法拉第发现硫化银的电导率随温度升高而迅速增加。1873年史密斯发现光照能改变硒的电导率,1874年布朗发现硫化铅与一个探针接触时呈现整流效应。但对半导体中电子输运过程的深刻理解则归因于量子力学的创立及基于单电子理论的能带模型的建立。20世纪30年代末,莫特、达维多夫和肖特基发展了金属–半导体接触的整流理论。在此基础上肖克利、布拉顿和巴丁发明了第一个固体放大器——点接触晶体管,并于1956年获得诺贝尔物理学奖。这一发明及其后来的结型晶体管的制作是半导体器件发展史上的划时代突破,是固体电子学时代的开始。20世纪50年代后期基尔比和诺伊斯发明了集成电路,实现了电路的微型化,引发了电子技术的革命。1958年江崎玲於奈发现了pn结二极管中的电子隧道现象,因此而获得1973年诺贝尔物理学奖。由两种不同半导体材料直接接触构成的半导体异质结构概念是1960年前后由克罗默和阿尔弗洛夫提出的。1982年克利青(Klitzing)在超薄的异质结构中发现了基于反型层中二维电子运动的量子霍尔效应并获1985年诺贝尔物理学奖。其后崔琦和施特默在超高纯半导体材料中又发现分数量子霍尔效应。劳克林用量子流体的理论进行了解释,并与崔琦、斯特默(Stormer)分享了1998年诺贝尔物理学奖。半导体异质结构的发展产生了更快的晶体管——高电子迁移率晶体管及性能更优良的激光器——双异质结激光器。克罗默和阿尔弗洛夫因此获得2000年诺贝尔物理学奖。1970年江崎玲於奈和朱兆祥首先提出超晶格的概念。它是一种人造的周期性结构,其中电子的运动在一个方向上受到限制即电子在二维平面内运动,这种结构称为量子阱。如果电子的运动在两个维度方向上均受到限制时,这种结构称为量子线。若电子在三个维度方向上的运动均受到限制则称为量子点。量子结构中的电子能态具有离散的而不是连续的结构,因此载流子的分布是离散的。通过制作量子结构,不仅将材料的能带变成离散能级或子能带,甚至可以改变能带结构,把间接带隙变为直接带隙,因此将大大改善半导体器件的性能。量子阱、量子点激光器及正在研究的单电子晶体管都是具有量子结构的半导体器件。半导体量子结构的制备,量子效应及量子器件的研究正成为21世纪半导体物理及器件物理研究的主导方向,并将引起以集成电路光电子器件及光电集成为基础的信息产业的新的革命。

半导体 semiconductor 导电能力介于导体与绝缘体之间的一种材料。其能量系统分为许可能带和禁带,禁带处于价带和导带之间。半导体的禁带宽度较窄,在室温下由热激发就可能引起显著的电离。热电离产生自由电子和自由空穴,半导体的导电过程依赖于这两种载流子。在半导体中掺入杂质将大大改变其导电能力,可制得掺杂半导体。如果材料中自由电子密度大于自由空穴密度称n型半导体,反之称为p型半导体。未掺杂、无缺陷的半导体具有相等的自由电子和自由空穴密度称为本征半导体,而掺杂的半导体称为非本征半导体。半导体一般是晶体材料,通常由四价或平均为四价的原子组成的类金刚石材料,硅和锗是常见的单质半导体,砷化镓是最常见的化合物半导体。

一、半导体物理学
Semiconductor Physics

能带 energy band 相邻原子在组成固体时,其相应的电子能级由于原子间的相互作用而分裂,由于固体中包含的原子数很大,分离出

来的能级十分密集，形成一个在能量上准连续的分布即能带。由不同的原子能级所形成的允许能带之间一般隔着禁止能带。

导带 conduction band 根据能带理论，固体中的电子态能级分裂为一系列的带，在带内能级分布是准连续的，带与带之间存在有能量间隙。在非导体中，电子恰好填满能量较低的一系列能带，再高的各带全部都是空的，在填满的能带中尽管存在很多电子，但并不导电。在导体中，则除了完全填满的一系列能带外，还有只是部分地被电子填充的能带，这种部分填充带中的电子可以起导电作用，称为导带。半导体属于上述非导体的类型，但满带与空带之间的能隙比较小。通常把半导体一系列满带中最高的能带称为价带，把半导体中一系列空带中最低的能带称为导带。

价带 valence band 半导体和绝缘体中能量较低的若干能带是被电子填满的，其中能量最高的能带称为价带，价带是和原子中最外层轨道上的价电子的能级相对应的。

带隙 band gap 固体的能带结构中填充电子的最高能带与最低空能带之间的能量间隔。对半导体而言带隙宽度即禁带宽度。

深能级 deep level 距导带底较远的施主能级和离价带顶较远的受主能级称为深能级。相应的杂质称为深能级杂质。深能级杂质能够产生多次电离，每次电离相应地有一个能级，则在禁带中引入若干个能级。而且，有的杂质既能引入施主能级，又能引入受主能级。深能级杂质一般含量极少，而且能级较深，它们对载流子浓度和导电类型的影响没有浅能级杂质显著，但对于载流子的复合作用比浅能级杂质强，故这些杂质又称为复合中心。非Ⅲ、Ⅴ族杂质在硅、锗中往往产生深能级。硅中的金杂质，可测到二个深能级，一个是施主能级，另一为受主能级。金是典型的复合中心，在制造高速开关器件时，常有意掺入金以提高器件的速度。

准费米能级 quasi-Fermi level 当半导体材料中存在非平衡载流子时，导带电子和价带电子在各自能带中热跃迁概率大，而处于热平衡状态；导带电子与价带电子之间，热跃迁概率小，处于不平衡状态。因此用电子准费米(Fermi)能级 $(E_F)_n$ 和空穴准费米(Fermi)能级 $(E_F)_p$ 分别描述非平衡半导体材料中电子浓度 n 和空穴浓度 p：

$$n = N_c e^{-\frac{E_c-(E_F)_n}{KT}}$$

$$p = N_v e^{-\frac{(E_F)_p-E_v}{KT}}$$

其中 N_c、N_v 为导带和价带的有效态密度，E_c、E_v 为导带底和价带顶的能量。$(E_F)_n \neq (E_F)_p$。准费米能级概念的引入对分析实际半导体器件工作原理十分重要。

载流子 carrier 指荷载电流的粒子，它们在电场作用下能作定向运动而形成电流。金属中只有电子一种载流子，在电介质中是正、负离子，半导体中有电子和空穴两种载流子。有两种载流子参与导电是半导体的一大特点。在金属和电介质中，载流子数目一般不变，在半导体中它们的数目随其中的杂质含量和外界条件(如加热、光照等)的变化而显著变化。

多数载流子 majority carrier 半导体的电导依赖两种载流子，即导带中的电子和价带中的空穴。在掺杂半导体中，居多数的一种载流子对电导起支配作用，称为多数载流子。如 n 型半导体中电子为多数载流子，p 型半导体中空穴为多数载流子。

少数载流子 minority carrier 同一种半导体材料中与多数载流子带相反电荷的载流子。如 n 型半导体中的空穴和 p 型半导体中的电子均为少数载流子。热平衡条件下，非简并半导体中电子浓度 n 与空穴浓度 p 满足

$$np = n_i^2 C T^3 e^{-\frac{E_g}{KT}}$$

其中 n_i 为本征载流子浓度，E_g 为禁带宽度。T 为温度。因此在本征激发尚不显著的温度范围内，多数载流子浓度可以近似认为与掺杂浓度相等，基本不随温度而改变。少数载流子浓度随温度升高而迅速增加。对于同种半导体，掺杂浓度越高，少数载流子浓度越低。对于相同掺杂浓度，材料的禁带宽度 E_g 越大，少数载流子浓度越低。虽然热平衡少数载流子对电导的作用较小，但非平衡少数载流子，如 pn 结正向注入的非平衡少数载流子，对器件的

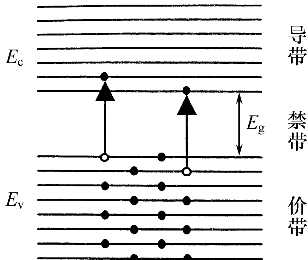
工作起支配作用。

载流子寿命 carrier lifetime 在热平衡条件下,电子不断地由价带激发到导带,产生电子空穴对,与此同时,它们又不停地因复合而消失。平衡时,电子与空穴的产生率等于复合率,从而使半导体中载流子的密度维持恒定。载流子间的复合使载流子逐渐消失,这种载流子平均存在的时间,就称之为载流子寿命。

非平衡载流子寿命 nonequilibrium carrier lifetime 当半导体由于外界作用注入非平衡载流子时,它处于非平衡状态。载流子间的复合使非平衡载流子逐渐消失。在注入非平衡载流子浓度不是太大的简单情况下,非平衡载流子按下列规律消失:$\Delta n=(\Delta n)_0\exp(-t/\tau)$。显然,式中 τ 即为非平衡载流子平均存在的时间,通常称为非平衡载流子寿命。由于在非平衡状态下,非平衡少子的影响起主导作用,因而 τ 又称为非平衡少子寿命,而 $1/\tau$ 表示非平衡载流子的复合率。非平衡载流子寿命是一个结构灵敏的参数,它与材料的种类、完整性、某些杂质的含量以及样品的表面状态有密切的关系。

本征载流子浓度 intrinsic carrier concentration 本征半导体材料中自由电子和自由空穴的平衡浓度。

空穴 hole 是指半导体中的一种载流子。半导体内部的热运动、外部光照或在半导体内掺入受主杂质,都可以使半导体的价带失去一些电子,原来被电子填满的价带顶部出现一些空能级。在外电场和磁场作用下,这些仍留在满带中的电子,也能够导电。满带电子的这种导电作用等效于把这些空的量子状态看做带正电荷的准粒子的导电作用,称这些价带中空



的量子状态为空穴。空穴带正电荷性,还具有正的有效质量。所以半导体中除了导带电子导电作用外,还有价带空穴的导电作用。

有效质量 effective mass 晶体中的电子或空穴在外加电场、磁场中运动,常常可以用准经典运动规律来描述。根据晶体中电子运动加速度与外力之间的关系,与经典力学牛顿第二定律相类比,引入了有效质量 m^*。晶体中的电子始终受到晶体势场的作用,在有外力作用时,电子运动状态的变化是外力与晶体势场共同作用的结果。引入有效质量的意义在于,它概括了晶体势场对电子的作用,把电子运动的加速度与外力直接联系起来,从而使分析简化。

载流子注入 carrier ejection 半导体通过外界作用而产生非平衡载流子的过程称作载流子注入。利用光照在半导体内引入非平衡载流子的方法称为载流子的光注入。除光照外,还可以利用电的或其他能量传递方式在半导体中注入载流子,最常用的是电的方法,称作载流子电注入。电注入载流子现象的发现直接导致半导体放大器的发明。

在不同条件下,载流子注入的数量是不同的。当注入载流子浓度与热平衡时多数载流子浓度相比很小时,多数载流子浓度基本不变,而少数载流子浓度近似等于注入载流子浓度,这通常称作小注入情况;若注入载流子浓度可与多数载流子浓度相比,则称作大注入情况。

复合中心 recombination center 半导体中某些杂质和缺陷可以促进载流子复合,对非平衡载流子寿命的长短起决定性作用,这些杂质和缺陷称为复合中心。作为复合中心的杂质与缺陷一般在禁带中引入一个或几个深能级,它们既可以俘获电子又能俘获空穴,从而促进了复合过程。对载流子复合有促进作用的杂质很多,例如硅和锗中的 Au,Cu,Fe,Ni,Zn 以及许多其他重金属杂质都有明显的复合作用。金是一种有效的复合中心,在半导体器件中,经常引入金以降低注入载流子寿命,提高器件的开关速度。

直接复合 direct recombination 按照电子和

空穴在复合时所经历的具体过程的不同,可把复合分为直接复合和间接复合两类。直接复合是导带中的电子直接落入价带与空穴复合。而间接复合则是导带中的电子首先被禁带中某一个中间能级所俘获,然后落入价带与空穴相复合。

表面复合 surface recombination 位于半导体表面禁带内的表面态(或称表面能级)与体内深能级一样可作为复合中心,起着对载流子的复合作用。为此,通常把半导体非平衡载流子通过表面态发生复合的过程称为表面复合。与体复合相比表面复合更为复杂,它不仅依赖于表面复合中心浓度及体掺杂浓度,还依赖于表面势。而表面势又是对周围环境敏感的参量,所以表面复合会因表面环境条件的变化而发生变化。半导体器件通常都要求较低且稳定的表面复合速度,因此,在半导体工艺技术上如何控制表面复合是一个非常重要的问题。

辐射复合 radiative recombination 根据能量守恒原则,电子和空穴复合时应释放一定的能量,如果能量以光子的形式放出,这种复合称为辐射复合。辐射复合可以是导带电子与价带的空穴直接复合,这种复合又称为直接辐射复合,是辐射复合中的主要形式。此外辐射复合也可以通过复合中心进行。在平衡态,载流子的产生率总与复合率相等。

非辐射复合 nonradiative recombination 按照复合时释放能量的方式不同,复合可分为辐射复合和非辐射复合。以除光子辐射之外的其他方式释放能量的复合称为非辐射复合。非辐射复合中主要有多声子复合和俄歇复合。

陷阱 trap 半导体中能够俘获电子或空穴的晶体缺陷或化学中心。热平衡时由缺陷或杂质引入的能级上具有一定数量的热平衡电子,当半导体内引入非平衡载流子时,这些能级上的电子数目将发生变化,如果能级上电子数目增加则该能级具有俘获非平衡电子能力,该能级称为电子陷阱。反之若该能级上电子数目减少则该能级具有俘获空穴的能力称为空穴陷阱。当非平衡载流子落入陷阱后基本上不能直接发生复合,而必须首先激发到导带或价带,然后才能通过复合中心而复合。在整个过程中,载流子从陷阱激发到导带或价带所需的平均时间比它们从导带或价带发生复合所需的平均时间长得多,因此陷阱的存在大大增加了从非平衡恢复到平衡态的弛豫时间。

猝灭 quenching 激发态通过非辐射复合的途径达到弛豫。如热猝灭是通过处于发光中心激发态的电子与晶格碰撞把激发能交给晶格,产生大量的声子而无辐射地回到基态。光、电场及磁场等外界因素均可产生发光猝灭。

迁移率 mobility 见“漂移电流”。

漂移电流 drift current 在没有电场作用时,半导体中载流子在运动中不时遭到散射作杂乱无章的热运动,并不形成电流。当有电场存在时,使所有载流子沿电场力方向作定向运动。这种载流子在热运动的同时,由于电场作用而产生的沿电场力方向的定向运动称作漂移运动。所构成的电流为漂移电流。定向运动的平均速度叫做漂移速度。在弱电场下,载流子的漂移速度 v 与电场强度 E 成正比

$$v = \mu E$$

式中 μ 是载流子迁移率,简称迁移率。它表示单位场强下载流子的平均漂移速度,单位是 $m^2/V \cdot s$ 或 $cm^2/V \cdot s$。迁移率数值决定于半导体能带结构、材料中杂质和缺陷对载流子的作用、以及其中原子的热运动等因素。通常在同一种半导体中,电子的迁移率比空穴的大。迁移率是反映半导体载流子导电能力的重要参数。

漂移迁移率 drift mobility 在一块均匀的半导体材料中,用局部的光脉冲照射会产生非平衡载流子,光脉冲停止后,整个非平衡载流子的“包”在电场作用下以漂移速度 $v = \mu|E|$ 向样品一端运动,若已知电场强度 $|E|$ 及脉冲电荷包漂移的距离 x,可计算出迁移率 $\mu = x/(|E|t)$,其中 t 为光脉冲停止时刻与示波器探测到非平衡载流子电荷包的时间间隔,这样测得的迁移率为漂移迁移率。漂移迁移率是非平衡载流子的平均漂移速度与电场强度的绝对值之比。

界面散射 interface scattering 半导体载流子沿表面层运动的表面迁移率总低于体内迁

移率,这种由于沿表面层运动的载流子受到的不同于体内的附加散射,就称之为表面散射或界面散射。界面散射机制比较复杂。例如表面粗糙度散射,是由于表面粗糙不平整引起的散射过程,这时表面不是一个平面而是像一个被弯曲了的薄片,因此当电子沿表面运动时将受到干扰,使迁移率降低。这种散射作用对薄的表面空间电荷层较明显,例如强反型层就属于这种情况。

场效应 field effect 电场对半导体的影响。在电场作用下半导体中自由电子和自由空穴的平衡遭到破坏。如 MOS 结构在不同的电场作用下,由于电场对半导体内载流子的吸引或排斥作用而在半导体表面附近产生载流子的积累或耗尽,通常把这种半导体表面电导受垂直电场调制的效应称为场效应。

沟道 channel 半导体中由于外加电场引起的沿长度方向的导电层。如 MOS 结构中当施加外部电场时在半导体表面形成的积累层及反型层。

能带弯曲 band bending 半导体能带图表示电子在原子周期势场中处于不同能量的能级上,电子能量与其所在的半导体的静电势成正比。显然,如果半导体中静电势到处都相同,则能带是水平的,即平带状态。反之,当半导体表面存在垂直的外加电场时,半导体中各处静电势就不同,则能带就相应地发生弯曲,称为能带弯曲。

场发射 field emission 在外电场作用下,非加热的金属或半导体表面处表面势垒变窄,由于量子力量隧道效应引起的表面电子发射。在电子器件和表面物理研究中可以应用的几个场发射阴极是钨尖、硅尖、金刚石阴极、碳纳米管阴极及电子枪用场发射阴极。

热电子 hot electron 半导体中的电子可以吸收一定能量(如光子、外电场等)而被激发,处于激发态的电子称为热电子,处于激发态的电子可以向较低的能级跃迁,如果以光辐射的形式释放出能量,这就是半导体的发光现象。

量子阱 quantum well 量子阱是一种人工设计采用外延方法生长的半导体微结构。其主要特性是电子(空穴,有时还包括光子)在空间上被限制在一个很薄的区域内运动,该区域的厚度小于电子的德布罗意波长,电子(空穴)行为表现出二维特征。量子阱结构主要用于发光器件和光电探测器件。和非量子阱结构相比,由于在量子阱中电子(空穴)相对比较集中(有时光子也比较集中),所以有很高的量子效率,用于半导体激光器能大幅度降低阈值电流密度,增加输出功率。量子阱结构中,与量子阱层相对的还有势垒层,用以限制电子(空穴)在垂直于阱面方向上的运动。量子阱结构通常用分子束外延或金属有机化学气相淀积方法制备。

量子线 quantum wire 量子线是一种人工微结构,其主要特性是电子(空穴)在空间上被限制在一个很细的线状区域内运动,该区域的横向尺度小于电子的德布罗意波长,电子(空穴)行为表现出一维特征。目前量子线结构主要用于半导体激光器。与量子阱激光器相比,量子线激光器阈值电流密度更低,输出功率更大,而且输出激光的波长随温度的变化更小。量子线的制作分为自组装生长和微加工两类。

量子点 quantum dot 量子点是指电子(空穴)在空间上三个方向都受到限制,只能在微小空间中运动的人工微结构,该空间区域的尺度在三个方向上都小于电子的德布罗意波长,电子(空穴)行为表现出零维特征。目前量子点结构主要用于制作半导体激光器和纳米电子器件。在所有的量子结构激光器中,量子点激光器阈值电流密度最低,输出功率最大,而且输出激光的波长不随温度变化。量子点的制作主要靠自组装生长。

半导体超晶格 semiconductor superlattice 由一组多层薄膜周期重复排列而成的单晶。多层薄膜中各层厚度从几个到几十个原子层范围。各层的主要半导体性质如带隙和掺杂水平可以独立地控制。多层薄膜的周期可以在生长时人为控制,因而得到了人造的晶体结构即超晶格。多层薄膜中各层的组分突变的超晶格称为组分调制超晶格;各层掺杂原子型号发生突变的超晶格称掺杂调制超晶格。组分调制超晶格的能带图与多量子阱类似,惟一的区别是超晶格中由于势垒层厚度小于电子的德布罗意(de

Broglie)波长，相邻势阱中的电子波函数发生交叠，因而多量子阱的离散能级将展变为能带，其能带宽度及位置与势阱深度、宽度及势垒厚度有关。超晶格具有一些普通半导体中没有发现的有用性质。

共振隧道 resonance tunneling 在低偏压下相邻量子阱的相同子带间的隧道穿透。此时电子穿过一个或数个势垒而不失去其相位关系。共振隧穿发生时可以伴随声子发射过程。

单电子隧道效应 single electron tunneling effect 一个包含极少量电子，具有极小电容值的粒子称为库仑岛，其能量由电势能及电子间互作用库仑能组成，可表示为 $E=-QV_g+Q^2/2C$。当库仑岛上增加或减少一个电子时，其能量增加 e^2/C。单个电子进入或离开库仑岛需要 e^2/C 的激活能。在极低温和小偏压下，导体内的电子不具备 e^2/C 的能量，故电子不能穿越库仑岛，此现象称为库仑阻塞。通过给库仑岛加栅压可以改变其电势能及总能量，在某个特定的栅压下，库仑岛总电荷 $Q=Ne$ 和 $Q=(n+1)e$ 的最小能量是简并的，即态密度间隙消失。此时，即发生单个电子隧穿库仑岛的现象，称为单电子隧穿效应。

整数量子霍尔效应 integer quantum Hall effect 二维电子气系统在强磁和低温条件下的霍尔效应表现出明显的量子化性质。1980 年冯克利青(Von Klitzing)等人首先观测到了量子化霍尔效应。他们测量了 Si MOSFET 反型层中二维电子气系统中的电子在 15T 强磁场和低于液 He 温度下的霍尔电压 V_H，沿电流方向的电势差 V_p 与栅压 V_G 的关系。当磁场垂直于反型层，磁感应强度 B 与沿反型层流动的电流强度 I 保持不变时，改变栅压 V_G，可改变反型层中载流子密度 n_s。在正常的霍尔效应中应有 $V_H\propto 1/V_G$(如果 $n_s\propto V_G$)，但在强磁和低温下，某些 V_G 间隔内，V_H 曲线出现平台，对应于平台时的 V_P 最小趋近于零，由此得到的霍尔电阻 $\rho_{XY}=-V_H/I$ 是量子化的，其值为

$$\rho_{XY}=\frac{h}{iq^2}, i=1,2,3,\cdots$$

它只与物理常数 h(普朗克常数)和 q 有关。霍尔电阻与整数 i 相联系的量子化性质称整数量子霍尔效应。在 1K 以下，实验还进一步观察到 i 为分数的霍尔平台，即分数量子化霍尔效应。在调制掺杂的 GaAs-GaAlAs 等异质结构中也能观测到量子化霍尔效应。

分数量子霍尔效应 fractional quantum Hall effect 见“整数量子霍尔效应”。

量子限制效应 quantum confinement effect 微结构材料三维尺度中至少有一个维度与电子德布罗意(de Broglie)波长相当，因此电子在此维度中的运动受到限制，电子态呈量子化分布，连续的能带将分解为离散的能级，当能级间距大于某些特征能量(如热运动量 K_B；塞曼能 hw，超导能隙 Δ 等)时，系统将表现出和大块样品不同的甚至是特有的性质，例如超晶格中由于能级离散引起的带隙展宽及吸收边的蓝移。

Wannier 激子 Wannier exciton 半导体吸收具有带隙能量的光子时产生的电子空穴对，在低温下没有足够的动能使它们分开，相互靠近的电子、空穴由于库仑互作用而形成的一个束缚态，很像氢原子中的质子与电子那样。Wannier 激子的能量为 $E_n=-13.6\mu/\varepsilon^2n^2$，$n$ 为量子数，ε 为介电常数，μ 是电子和空穴的折合有效质量，它的能级在导带底以下几个毫电子伏范围，因而在半导体的基本吸收边的长波侧可看到几个清晰的激子吸收峰，对应于处在量子数 n 较低的一些激子状态。

扩展态 extended state 非晶态材料中电子本征波函数不再是 Bloch 函数，其电子本征态分为扩展态和局域态，扩展态波函数遍及整个材料，电子占据整个材料具有有限的概率。由于晶格势能的无序涨落引起的散射，扩展态电子的迁移率远小于晶体中的共有化电子。

局域态 localize state 固体材料中与特定位置相关，具有特定能量的电子态。当一个电子占据此状态时，它被束缚于具有特定能量的特定位置附近。无序固体中由于周期性被破坏，将产生带尾局域态。材料中的缺陷态或施主、受主杂质上的电子态，或强掺杂半导体中的带尾态也都是局域态。存在局域态是无序的标志。局域态电子的迁移必须通过跳跃

(hopping)发生。

迁移率边 mobility edge 无序系统中扩展态与带尾局域态间的能量边界。如导带扩展态与导带尾的边界 E_c 和价带扩展态与价带尾的边界 E'_c。如果把迁移率看成为电子态能量的函数,Mott 提出在 E_c, E'_c 处存在迁移率的突变。

带尾 band tail 晶态半导体由于原子排列的长程周期性,导带和价带具有清晰的边界。非晶半导体及重掺杂半导体由于原子排列的长程周期性的破坏、晶格势能的无序涨落使导带及价带向禁带中延伸形成带尾,带尾电子态是局域态。

隙态 state in gap 非晶态半导体材料能带模型中迁移率隙中的电子状态称为隙态。隙态分为两类:一类是带尾态,包括导带尾及价带尾;另一类是与诸如悬挂键等缺陷相关联的局域态。隙态对非晶态半导体材料的光学和电学性质有重要影响。性能优良的非晶态半导体器件要求隙态密度低的材料。

吸收 absorption 光在半导体中传播时具有衰减现象,称为光吸收。半导体通常能强烈地吸收光能,吸收系数大约是 10^5/cm 的量级。材料吸收辐射能量会导致电子从低能级跃迁到较高的能级。电子在带与带之间的跃迁所形成的吸收过程称作本征吸收。要发生本征吸收,光子能量必须等于或大于禁带宽度 E_g。当入射光频率低于 ν_0(或波长大于 λ_0)时,吸收系数迅速下降,不可能发生本征吸收。这种吸收系数显著下降的特定频率 ν_0(或特定波长 λ_0),称为半导体的本征吸收限。不同材料具有不同的禁带宽度,可得相当的本征吸收长波限。半导体中的光吸收主要是本征吸收。另外,还有激子吸收、自由载流子吸收、杂质吸收和晶格吸收等。

吸收光谱 absorption spectrum 光在半导体材料中的吸收系数随光的频率(或波长)而变化的谱线称为吸收光谱。研究半导体本征吸收光谱可决定禁带宽度,是了解能带的复杂结构和区分直接带隙和间接带隙半导体的重要依据。其他吸收光谱对研究半导体性质也有重要意义。

光学带隙 optical band gap 非晶态半导体的本征吸收边附近的吸收曲线通常分为三个区域:价带扩展态到导带扩展态的吸收为幂指数区;价带扩展态到导带尾的吸收为指数区;价带尾到导带尾的吸收为弱吸收区。非晶半导体的带隙没有明确的定义。定义其光学带隙的简单方法是 E_{03} 或 E_{04},即吸收系数为 10^3cm^{-1}或 10^4cm^{-1}时所对应的光子能量。物理意义较明确的定义方法是 Tauc 带隙,主要考虑幂指数区的带-带吸数,此时 $\alpha(h\nu)\propto c(h\nu\text{-}E_g)^\gamma$, C 和 γ 与能带结构有关,对于抛物线形能带结构 γ 取 2,由$(\alpha h\nu)^{1/2}\sim h\nu$ 关系曲线求得的 E_g 称为 Tauc 带隙。

发光 luminescence 发光是物质的一种非热辐射的光发射。热辐射的基本特征是不随发热体的性质而改变。发光则反映材料的特征,它是外界因素如光、电等与物质的相互作用,使物质从基态转变为激发态,激发态经过辐射跃迁过程达到弛豫而发出的紫外、可见或红外辐射。外界作用一旦停止,发光也将结束,但有一个延续时间,比光的振动周期(10^{-14}秒)长得多。可以根据此原理把发光与散射、反射等其他光发射区分开来。

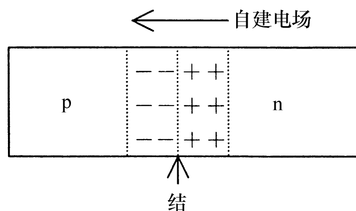
由于激发方式的不同,发光可分为光致发光、电致发光、阴极射线发光、化学发光、辐射发光等。其主要应用领域在光源、显示器、探测器及光电子器件等方面。

光致发光 photoluminescence 材料通过吸收光子产生激发态的辐射跃迁。激发过程为单光子或多光子吸收过程。光致发光包括光吸收、能量传递、光发射等过程,这些过程与材料结构、成分及环境原子排列有关,光致发光技术是研究固体中电子过程的重要手段。一般情况下光致发光光子的能量小于激发光子的能量(斯托克斯位移),在特定条件下发射光子的能量可以超过激发光子的能量(反斯托克斯位移)。日光灯是利用汞蒸气放电产生的紫外光激发涂饰在灯管壁上的发光材料而发出可见光的。

电致发光 electroluminescence 固体器件或化学电池中由于电荷流动而引起的发光现象。固体器件的电致发光主要有两种类型:本征电致发光及注入型电致发光。本征电致发光通

常将发光材料与绝缘介质混合置于两极板间或将发光材料薄膜夹在两绝缘层之间，在交变电场作用下电子场致碰撞激发或离化发光中心而引起发光。例如用 ZnS 薄膜制成的字符显示屏、计算机终端显示屏等。注入型电致发光器件是 pn 结型发光器件，是利用注入的少数载流子和多数载流子间的辐射复合而发光，如 GaAs、GaP、GaN 等不同波段的发光二极管。聚合物半导体发光器件也是注入型电致发光器件。

pn 结 p-n junction 在一块 n 型(或 p 型)半导体单晶上，用适当的工艺方法(如合金法、扩散法和离子注入法等)把 p 型(或 n 型)杂质掺入其中，使这块单晶的不同区域分别具有 p 型和 n 型的导电类型，在二者的交界面处就形成了 pn 结。pn 结刚形成时，p 区的多数载流子空穴向 n 区扩散，在 n 区边界附近与电子复合。p 区失去空穴，在其边界附近就剩下带负电的受主离子；同理，n 区电子也向 p 区扩散，在其边界附近剩下带正电的施主离子。结果在 p 区和 n 区交界面的两侧形成带正、负电荷的区域，称为空间电荷区，也叫耗尽区(多数载流子缺乏)。空间电荷区内正、负离子电荷总量相等，其中形成的电场方向由 n 区指向 p 区，它就是 pn 结的自建电场，如图所示。在平衡时，自建电场的大小正好能阻止空穴和电子进一步扩散，使空间电荷区宽度保持一定。当结上加正向电压时(即 p 区接电源正极，n 区接负极)，自建电场削弱，使多数载流子(p 区的空穴，n 区的电子)容易通过 pn 结，因而电流较大，这时 pn 结叫做正偏结，电流称为正向电流；当结上加反向电压时，内建电场增加，只有少数载流子(p 区的电子，n 区的空穴)易通过 pn 结，因而电流很小，这时 pn 结叫做反偏结，电流叫做反向电流。pn 结具有单向导电性，这是 pn 结最基本的性质之一。pn 结这种整流特性是很多半导体器件和电路的核心。整流器及许多其他类型的二极管都是只含 1 个 pn 结的器件；一般结型晶体管是 2 个 pn 结构成的器件；晶体闸流管是含有 3 个或 4 个 pn 结的器件。



耗尽区 depletion region 在半导体 pn 结、肖特基结、异质结中，由于界面两侧半导体原有化学势的差异导致界面附近能带弯曲，从而形成能带弯曲区域电子或空穴浓度的下降，这一界面区域在半导体物理中称为耗尽区。

缓变 pn 结 graded p-n junction 从 p 区到 n 区掺杂浓度逐渐改变的 pn 结，如用固态扩散工艺制造的 pn 结。大多数缓变 pn 结数学上可作为线性缓变结处理。通常由扩散工艺制备的 pn 结为缓变 pn 结，但在浅扩散结或高反偏时它更接近于单边突变 pn 结。

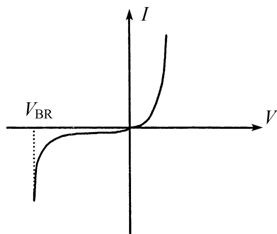
突变 pn 结 abrupt p-n junction 用合金法制造的 pn 结，n 型区中施主杂质浓度和 p 型区中受主杂质浓度都是均匀分布的。在交界面处杂质浓度由 n_A(p 型区)突变为 n_D(n 型区)，具有这种杂质分布的 pn 结称为突变结。实际的突变结，两边的杂质浓度差很多，通常称这种结为单边突边结(记为 p^+n，或 n^+p)。

pn 结电容 p-n junction capacitance pn 结具有电容特性。pn 结电容包括势垒电容和扩散电容两部分。pn 结的耗尽层宽度随加在 pn 结上的电压而改变。当 pn 结加正向偏压时，势垒区宽度变窄、空间电荷数量减少，相当于一部分电子和空穴“存入”势垒区。正向偏压减小时，势垒区宽度增加，空间电荷数量增多，这相当于一部分电子和空穴的“取出”。对于加反向偏压情况，可作类似分析。pn 结的势垒宽度随外加电压改变时，势垒区中电荷也随外加电压而改变，这和电容器充放电作用相似。这种 pn 结的电容效应称势垒电容。另外，在正偏结中，有少数非平衡载流子分别注入 n 区和 p 区的一个扩散长度范围内(称做扩散区)，其密度随正向电压的增加而增加，即在两个扩散区内储存的少数非平衡载流子的数目随 pn 结

的正向电压而变化。这种由于扩散区的电荷数量随外加电压的变化所产生的电容效应,称为 pn 结的扩散电容。pn 结电容是可变电容。势垒电容和扩散电容都随外加电压而变化。pn 结电容使电压频率增高时,整流特性变差,是影响由 pn 结制成器件高频使用的重要因素。利用 pn 结电容随外加电压非线性变化特性,可制成变容二极管,在微波信号的产生和放大等许多领域得到广泛的应用。

pn 结势垒 barrier of p-n junction pn 结的空间电荷区中,存在由 n 边指向 p 边的自建电场。因此,自然形成 n 区高于 p 区的电势差 V_d。相应的电子势能之差即能带的弯曲量 qV_d 称为 pn 结的势垒高度。pn 结的 p 区和 n 区的多数载流子运动时必须越过势垒才能到达对方区域,载流子的能量低于势垒高度,就被势垒阻挡而不能前进,这个垫垒叫做 pn 结势垒。pn 结的势垒高度与两边半导体中的杂质浓度及其分布、温度以及半导体材料的禁带宽度 E_g 有关。除 pn 结势垒外,还有金属与半导体接触的接触势垒(肖特基势垒)、半导体表面形成的表面势垒等。势垒高度受外加电场的影响,当外加电场削弱势垒区中电场时,势垒降低,载流子容易通过;外加电场加强势垒区的电场时,势垒高度升高,载流子不易通过。利用 pn 结势垒这一特性可制成整流、检波等多种半导体器件。

pn 结击穿 electrical breakdown of p-n junction 对 pn 结施加的反向偏压增大到某一数值 V_{BR}时,反向电流密度突然开始迅速增大的现象称为 pn 结击穿。发生击穿时的反向电压称为 pn 结的击穿电压,如图所示。



击穿电压与半导体材料的性质、杂质浓度及工艺过程等因素有关。pn 结的击穿从机理上可分为雪崩击穿、隧道击穿和热电击穿三类。前两者一般不是破坏性的,如果立即降低反向电压,pn 结的性能可以恢复;如果不立即降低电压,pn 结就遭到破坏。pn 结上施加反向电压时,如没有良好散热条件,将使结的温度上升,反向电流进一步增大,如此反复循环,最后使 pn 结发生击穿。由于热不稳定性引起的击穿,称为热电击穿,此类击穿是永久破坏性的。pn 结击穿是 pn 结的一个重要电学性质,击穿电压限制了 pn 结的工作电压,所以半导体器件对击穿电压都有一定的要求。但利用击穿现象可制造稳压二极管、雪崩二极管和隧道二极管等多种器件。

雪崩击穿 avalanche breakdown 当反向偏压很大时,势垒区中的电场很强,因而通过势垒区的电子和空穴可以在电场作用下获得很大的动能,当能量足够大时,和晶格碰撞而使价带电子激发到导带,产生新的电子-空穴对,这种现象称为"碰撞电离"。新生的电子-空穴以及原有的电子和空穴,在电场作用下,又可重新获得足够的能量,再次和晶格碰撞而产生电子-空穴对。如此继续下去,载流子增加犹如"雪崩"的特性,称为载流子倍增效应。由于倍增效应,使反向电流迅速增加从而发生击穿,这就是雪崩击穿的机理。雪崩击穿除与势垒区中电场有关外,还与势垒区宽度有关。势垒区宽的易发生雪崩击穿。

隧道击穿 tunnel breakdown 隧道击穿是在强电场下,由于隧道效应使大量电子从价带穿过禁带而进入导带所引起的一种击穿。因为最初是由齐纳(Zener)提出的,故又称齐纳击穿。当 pn 结的反向电压比较大时,势垒区能带发生倾斜,甚至可以使 n 区的导带底比 p 区的价带顶还低,使 p 区价带的电子有可能隧道穿过势垒到达 n 区导带中去,使反向电流急剧增大,发生隧道击穿。对于掺杂浓度比较高的情况下,势垒区薄,往往易发生隧道击穿。

金属-半导体接触 metal-semiconductor contact 在半导体片上淀积一层金属形成紧密的接触。硅器件和集成电路中大量采用的铝-硅

接触就是典型的实例。金属-半导体接触中最重要的有两类典型接触：一类是金属与半导体的没有整流作用的接触，称为欧姆接触，这种接触与一个电阻等效；另一类是整流接触，具有类似于pn结的单向导电性。上述特性是由于金属-半导体接触时，两者的功函数不同，电子可以从金属流向半导体，或半导体流入金属，从而使半导体表面形成表面势垒（又称阻挡层）或反阻挡层所致。反阻挡层是很薄的高电导的区域，它对金属和半导体接触电阻影响很小。表面阻挡层存在使金属-半导体接触具有整流作用。在半导体表面处的禁带中存在着表面态，对应能级称为表面能级。表面能级对表面势垒有很大的影响。

肖特基势垒 Schottky barrier 金属和半导体接触形成半导体表面势垒，此势垒又称肖特基势垒。

欧姆接触 Ohmic contact 金属与半导体接触形成非整流的接触，即欧姆接触。它不产生明显的附加阻抗，也不会使半导体内部的平衡载流子浓度发生显著的改变。欧姆接触在实际中有很重要的应用。半导体器件一般都要利用金属电极输入或输出电流，这就要求在金属和半导体之间有良好的欧姆接触。在超高频和大功率器件中，欧姆接触是设计和制造的关键问题之一。制作欧姆接触最常用的方法是用重掺杂的半导体与金属接触，常常是在n型或p型半导体上作一层重掺杂区后再与金属接触，形成金属$-n^+-n$或金属$-p^+-p$结构。

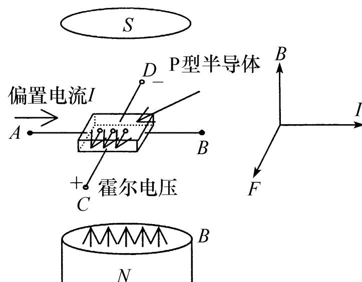
肖特基缺陷 Schottky defect 是一种化合物半导体中的点缺陷。在化合物MX中，在$T>0$K时，由于晶格热振动，能量大的原子离开原格点进入晶格间隙或进入表面，或蒸发到外界，而失去原子的晶格位置即出现空缺生成空位以符号V_M（或V_X）表示。空位是化合物半导体中常见的点缺陷之一。如果对一个按化学计量比组成的化合物MX晶体，在产生V_M的同时，也产生数目相同的V_X。此时产生的缺陷称肖特基缺陷，记作（V_M+V_X）。空位可以是中性，也可带正电或负电。它对化合物半导体的导电性能有较大的影响。

热离子发射 thermion emission 金属或半导体表面的电子具有热运动的动能足以克服表面势垒而产生的电子发射现象。金属或半导体向真空发射电子所需的最低能量称为逸出功或功函数，即表面势垒高度。在金属半导体接触界面同样存在热离子发射，此时所要克服的势垒由金属半导体接触势垒决定。

半导体异质结 semiconductor heterojunction 组成pn结的n型区和p型区用不同的半导体材料组成时，其过渡区就称之为半导体异质结。

拉曼散射 Raman scattering 拉曼散射是指入射光子与组成系统（如液体、透明玻璃、固体等）的分子间的非弹性碰撞引起的分子与光子间的能量交换，使一部分入射光子的能量发生改变，因此其波长改变的现象。由于能量守恒，光子获得或失去的能量应等于分子能量的改变。通过测量光子能量的改变可以检测分子能量的改变，这种改变通常与分子的转动，振动能量及电子能量有关。

霍尔效应 Hall effect 在半导体薄片的两端之间通以电流，如果在与薄片垂直的方向外加一磁场，则电子和空穴在洛伦兹力作用下，将沿着与磁场方向垂直的方向移动。如沿洛伦兹力的方向设置电极，则可检测出电压（霍尔电压）。这个现象称为霍尔效应。霍尔电场E_Y与电流密度J_X和磁感应强度B_Z成正比，即$E_Y=R_H J_X B_Z$，比例系数R_H称为霍尔系数。霍尔系数的数值与正负和半导体的导电类型、载流子浓度、迁移率大小以及温度、样品形状等因素有关。霍尔效应是研究半导体物理性质的一个很重要的方法，可测定载流子浓度、



导电类型和霍尔迁移率。利用霍尔效应制成的电子器件称为霍尔器件。由于霍尔器件有在静止状态下感受磁场的能力，而且构造简单、小型、坚固，同时是以多数载流子工作为主、频率响应宽、寿命长、可靠性高，所以在测量技术、自动化技术及信息处理等方面得到广泛的应用。常用材料有硅、锗和迁移率高的砷化镓、锑化铟、砷化铟等Ⅲ～Ⅴ族化合物半导体。

佩尔捷效应 Peltier effect 当两种不同的半导体或者半导体与金属相接触并接通电流时，接触面处除产生焦耳热以外，还要吸热或放热，称为佩尔捷效应，而且这个效应是可逆的。与两个不同金属接触相比，半导体之间相接触产生的效应要大得多。通过佩尔捷效应，使得一个接头不断吸热而产生低温，可制造温差发电器和制冷器。为了提高效率，必须选择塞贝克系数大的半导体材料，还必须选择热导率和电阻率小的材料。因此，一般常用 Bi_2Te_3、Sb_2Te_3、Bi_2Sb_3 等Ⅴ～Ⅵ族化合物半导体作温差制冷材料。

塞贝克效应 Seebeck effect 当两个不同的导体a和b两端相接，组成一个闭合线路，如两个接头A和B具有不同的温度，则线路中便有电流，这种电流称为温差电流，这个环路便组成温差电偶，产生电流的电动势称为温差电动势，其数值一般只与两个接头的温度有关。这个效应是于1821年由泽贝克发现的，故称为泽贝克效应，温差电动势也称为泽贝克电动势（Θ_{ab}示之）。定义温差电动势率 α_{ab}

$$\alpha_{ab} = \frac{d\Theta_{ab}}{dT}$$

α_{ab}为单位温差时的温差电动势，亦称泽贝克系数，单位为V/K。两个不同半导体也可构成闭合线路，当两个接头处温度不同时，也要产生温差电动势，而且数值比金属导体大得多。在室温附近，半导体的 α_{ab}有几百μV/K，而金属的 α_{ab}只在0.1与10μV/K之间。因此，半导体在热能与电能的转换上，可以有较高的效率，在温差发电方面有较广的应用。常用温差发电半导体材料有 Bi_2Te_3、ZnSb、PbTe、GeTe 和 $FeSi_2$ 等。

固体电子学 solid state electronics 固体电子学是随着固体器件特别是半导体/集成电路的空前发展出现的一门新兴边缘学科，该学科主要涉及用固体电子器件实现各种复杂电子系统。

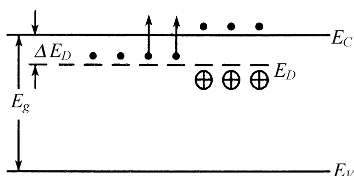
微电子学 microelectronics 是研究在固体（主要是半导体）材料上构成微小型化电子电路、子系统及系统的电子学分支学科，是当今电子学的最重要组成部分，是信息科学、计算机科学、固体电子学、医用电子学等学科的发展基础。微电子学包括半导体材料与器件物理、集成电路及系统的设计及制造，并与光电子学及超导电子学相互渗透。

纳米电子学 nanoelectronics 以纳米尺度材料为基础的器件制备、研究和应用的电子学领域为纳米电子学。由于量子尺寸效应等量子力学机制，纳米材料和器件中电子的形态具有许多新的特征。纳米电子学是当前科学界极为重视的研究领域，被广泛认为未来数十年将取代微电子学成为信息技术的主体，将对人类的工作和生活产生革命性影响。

二、半导体材料
Semiconductor Material

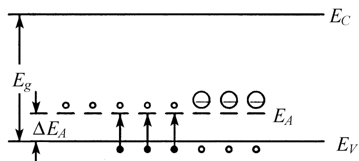
本征半导体 intrinsic semiconductor 完全不含杂质和缺陷，仅依赖本征载流子导电的半导体材料。实际半导体不能绝对地纯净，本征半导体一般是指导电主要由材料的本征激发决定的纯净半导体。

n型半导体 n-type semiconductor 主要依靠导带电子导电的半导体称为电子型或n型半导体。Ⅴ族元素在硅、锗中是替代式杂质，它们电离时能够施放电子而产生导电电子并形成正电中心，称它们为施主杂质或n型杂质。它们释放电子的过程叫做施主电离。施主杂质未电离时是中性的，称为束缚态或中性态，电离后成为正电中心，称为离化态。将被施主杂质束缚的电子能量状态称为施主能级，记为 E_D。$\Delta E_D \ll E_g$，施主能级位于离导带很近的禁带中，如图所示。通常，施主杂质是比较少的，



它们的相互作用忽略。因此,某一种杂质的施主能级是一些具有相同能量的孤立能级。在纯净半导体(又称本征半导体)中掺入施主杂质后,导带中导电电子增多,增强了半导体的导电能力。n 型半导体中电子称为多数载流子,空穴称为少数载流子。

p 型半导体 p-type semiconductor 主要依靠空穴导电的半导体称为空穴型或 p 型半导体。当纯净半导体(如硅晶体)中掺入Ⅲ族元素时,一个三价原子占据了硅原子的位置。三价原子有三个价电子,当它和周围的四个硅原子形成共价键时,还缺少一个电子,必须从邻近硅原子中夺取一个价电子,就在硅晶体共价键中产生了一个空穴。而三价元素接受一个电子后,成为带负电的离子,称为负电中心。这个空穴受三价离子的束缚力很弱,只需很少的能量(ΔE_A)就可以使空穴挣脱束缚,成为导电空穴。因为Ⅲ族杂质在硅中能够接受电子而产生导电空穴,并形成不能移动的负电中心,所以称它为受主杂质或 p 型杂质。空穴挣脱受主杂质束缚的过程称为受主电离。受主杂质未电离时是中性的,称束缚态或中性态。电离后成为负电中心,称为受主离化态。$\Delta E_A \ll E_g$,所以受主能级位于离价带顶很近的禁带中。一般情况下,受主能级也是孤立能级,如图所示。p 型半导体中,空穴是多数载流子,电子为少数载流子。



简并半导体 degeneracy semiconductor 包含非常高的杂质原子密度,以至自由电子在空间处于交叠状态的半导体材料,其费米能级处于导带之上(或价带之下)而不处在禁带之中。

多晶半导体 polycrystal semiconductor 由大量取向不同的小的单晶半导体颗粒构成的薄膜或体半导体材料。大多数半导体器件都是用单晶半导体材料制作。多晶半导体可用于制作太阳能电池、液晶显示器的薄膜晶体管开关矩阵及 MOS 晶体管的栅极材料等。

非晶半导体 amorphous semiconductor 具有半导体性质的非晶态材料称为非晶半导体。目前研究最多的两类非晶半导体是四面体键的非晶态半导体,主要是非晶硅、锗及其相关材料,另一类是硫系玻璃如 AS_3Se_2 等等。以非晶硅为例,每一个硅原子与其近邻的四个硅原子仍以共价方式键合,但键长、键角有一定畸变,因此原子的最近邻排列虽保持相对确定的位置即近程有序性,但失去了晶态固体中原子排列的长程周期性。晶格周期势场的无规涨落形成带尾局域态分布,而非晶态半导体材料所包含的大量缺陷主要是悬挂键形成带隙局域态的分布。

元素半导体 elemental semiconductor 指仅由一种元素组成的半导体材料。它们都处于Ⅲ族～Ⅶ族的金属与非金属的交界处。元素半导体因由单一元素组成,故在纯度、结构完整性和均匀性方面都优于其他材料,制造工艺和应用都较为成熟。其中应用最广的为硅、锗和硒等。

化合物半导体 compound semiconductor 通常所说的化合物半导体多指晶态无机化合物半导体,它是由两种或两种以上的元素化合而成的半导体材料。化合物半导体数量最多,研究出的约有一千多种。其中研究较多的二元化合物半导体是 GaAs、GaN、GaP、InP、InSb、InSn、CdS 和 SiC 等。Ⅲ-Ⅴ族二元化合物半导体 GaAs、InP 和 InSb 等与 Ge、Si 相比,它们迁移率高,可作高频、高速器件,禁带宽度大,利于做高温、大功率器件,能带结构是直接跃迁型,因此转换成光的效率高,可作半导体激光器和发光二极管等。GaAs 用于微波器件、激光器件和红外光源以及作其他外延材料的衬底;GaN 是重要的宽带隙半导体材料,可用于

制造兰光发光二极管、兰光发射激光器及紫外光探测器等，并在耐高温的 MOSFET 器件等方面具有重要的应用价值。GaP 主要用于发光二极管；InP 用以制造发光二极管和微波体效应二极管；InAs 和 Insb 主要用于霍尔器件；InSn 用于制作红外探测器；CdS 适宜于制造光电器件；SiC 也主要用于发光二极管。在集成电路方面 GaAs 也日益成熟，其运算速度比硅集成电路要快得多。由两种或两种以上的Ⅲ-Ⅴ族化合物还能形成多元化合物（也称混晶或固溶体半导体）。它们的能带结构和禁宽度随组分而变化，从而为Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体材料的应用开辟了更宽广的领域。目前应用较多的是 $GaAs_{1-x}P_x$、$Ga_{1-x}Al_xAs$、$In_xGa_{1-x}As$、$In_{1-x}Ga_xP$ 和 $Hg_{1-x}Cd_xTe$（$0 < x < 1$）等。$GaAs_{1-x}P_x$ 和 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 是制作注入发光器件的优良材料；$In_{1-x}Ga_xP$ 和 $In_xGa_{1-x}As$ 是制作微波振荡器的理想材料。$Hg_{1-x}Cd_xTe$ 可制作各类光电探测器，并适于制造 MOS（或 MIS）结构型的器件，所以 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 将是继硅、砷化镓等材料之后的第三代应用最广泛的电子材料。

液态半导体 liquid semiconductor 液态半导体具有液体的流动性，并且有晶体的光学异向性。其分子呈长形或其他规则形状，具有各向异性的物理性质，在一定的温度范围内分子呈规则排列，所以又称“液晶”。液晶是一种有机化合物。液晶物质的分子呈各向异性，具有强的电偶极矩的容易极化的特性，因此，受电场、磁场、热及声能等的刺激时，都能很灵敏地引起光学效应。利用这些效应，可以制成各类传感器。液晶显示器件广泛用于电子手表、计算器及仪表等，作为它们的数字显示器件。其特点是功耗微小（一般只需几微瓦）；低压驱动，可直接与大规模集成电路相匹配；液晶器件的结构可以做得很大，图像显示的自由度很高；显示器件发光是靠调制外界光达到的，无刺激感，不致引起视觉疲劳。利用液晶还可制成电磁场传感器，加速度传感器、电压传感器、超声传感器、温度传感器和激光传感器等。液晶激光传感器技术已应用于大屏幕投影显示器上，其他各类传感器性能也日趋成熟和稳定。

氧化物半导体 oxide semiconductor 指具有半导体特性的氧化物。如 MnO、Cr_2O_3、FeO、Fe_2O_3、CuO、SnO_2 和 ZnO 等。大多数氧化物半导体的主要用途是制作热敏电阻，它们的电阻值随温度的变化而显著变化，其电阻的温度系数有正有负或临界温度系数。SnO_2、ZnO、Fe_2O_3 等氧化物可用于制造半导体气敏元件，它们对某些可燃性气体、有毒气体非常灵敏，目前已制出探测某些气体（如 CO、H_2、C_3H_8 和易燃气体等）的气敏检测器、报警器等。近几年发展起来的 $MgCr_2O_4$-TiO_2、ZnO-Li_2O-V_2O_5 等多孔结构的金属氧化物，用以制造敏感器。

压电半导体 piezoelectric semiconductor 某些电介质，当沿着一定方向对其施力而使它变形时，内部就产生极化现象，同时在它的两个表面上产生符号相反的电荷，当外力去掉后，又重新恢复不带电状态，这种现象称为压电效应。利用这种效应可以把机械应力量转换成电量。压电半导体是兼有压电性质的半导体材料。CdS、CdSe、ZnO、ZnS、CdTe、ZnTe 等Ⅱ-Ⅵ族化合物，GaAs、GaSb、InAs、InSb、AIN 等Ⅲ-Ⅴ族化合物都属于压电半导体。它们具有一定的离子性，当施以应变时，正负离子会分开一定的距离，产生电极化，形成电场，发生压电效应。声波在这些压电材料中传播时也会产生压电电场，载流子便会受到该电场的作用。压电半导体兼有半导体和压电两种物理性能，因此，既可用它的压电性能研制压电式力敏传感器，又可利用其半导体性能加工成电子器件，将两者结合起来，就可研制出传感器与电子线路一体化的新型压电传感测试系统。

铁电半导体 ferroelectric semiconductor 当半导体材料的结构不具有对称中心时，它便可能具有压电性，这种半导体称为压电半导体。如果同时其元胞中的正负电荷重心不重合，便可出现自发极化而具有热释电性，如果这种自发极化可在外电场作用下偏转，它便成为铁电体。铁电体的一个重要特征是具有电滞回线，这种具备铁电特性的光导体称为铁电半导体。例如氧化锌是一种重要的压电半导体，但不是铁电半导体，如掺入锂去部分地替代锌，氧化

锌的正负电荷的重心将不再重合而出现自发极化甚至铁电性，因而成为铁电半导体。

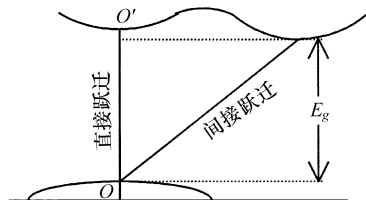
玻璃半导体 glass semiconductor 是指由无机氧化物（如二氧化硅和氧化硼）和过渡金属离子（如铁、铜、钼、钒和铬等）组成的氧化玻璃半导体和非氧化物（如硫、硒、磷、碲、硅和锗等元素中的某几种元素组成）玻璃半导体。它们是像玻璃一样的，具有无定形结构的半导体材料。在通常状态下，玻璃半导体为高阻绝缘体，并不显示半导体的特性。但在外界条件作用下，如电场、压力、温度或光照超过某一临界值后，可呈现半导体的导电性（即由“关态”转变到“开态”），具有开关效应。而且当外界条件取消后，不再恢复原状，这就是所谓的记忆效应。利用这两种效应，玻璃半导体可用来制造开关和记忆器件。由于制成的器件稳定性较差，且寿命短，多数尚未达到实用阶段。

硫系玻璃 chalcogenide 除氧外含有硫、硒、碲等硫系元素的玻璃称为硫系玻璃。硫系原子最外层有 6 个电子（s^2p^4），可以和本身或其他 2 个原子形成共价键，因而硫系原子以曲折链连接成玻璃体，其键角可变，结构柔软，软化温度低，硬度小。它是一种非晶态半导体材料，具有独特的电学及光电导性能。可用于制作开关元件及光电记忆元件。

聚合物半导体 polymer semiconductor 聚合物是由单体聚合而成具有链状结构的大分子所构成的材料，聚合物半导体指具有半导体性质的聚合物，电导率在 $10^{-8}\sim10^{3}(\Omega cm)^{-1}$范围内。聚合物半导体的禁带宽度与无机半导体的禁带宽度相当，例如，反式聚乙炔的禁带宽度为 1.5eV。掺杂和光照可以使聚合物半导体的电导率提高几个量级。取向化了的反式聚乙炔经掺杂后，沿分子链方向的电导率和铜属同一数量级。高电导率的聚合物被称为导电聚合物。聚合物半导体可用来制作发光二极管、场效应管等器件，其制备工艺简单、价格低廉、易成大面结，且便于分子设计，因而受到普遍重视。聚合物半导体发展十分迅速，并已开始步入实用阶段。但由于其稳定性较差，目前应用还受到一定限制。

直接带隙半导体 direct band gap semiconductor 直接带隙半导带中导带极小值和价带极大值相应于相同的波矢 K_0，这种半导体在本征吸收过程中，产生电子的直接跃迁，跃迁过程中，除能量守恒外，还遵循动量守恒，跃迁前后，波矢 K 不变。能量大于禁带宽度 E_g 的光子均能被吸收而形成一个连续吸收带。Ⅲ-Ⅴ族的 GaAs、InSb 等及Ⅳ-Ⅵ族化合物半导体均属直接带隙半导体。

间接带隙半导体 indirect band gap semiconductor 指 Ge、Si 和部分Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体，价带顶位于 K 空间原点，而导带底并不在 K 空间的原点。因此，间接带隙半导体中电子不仅吸收光子还与晶格交换能量，发生非直接跃迁，如图所示。伴随发射或吸收适当的声子，电子的波矢 K 可以改变。GaP 是间接带隙半导体，其发光也是间接跃迁产生的。但如果将 GaP 和 GaAs 混合制成 $GaAs_{1-x}P_x$ 晶体，则可调节 $x(0<x<1)$值改变混合晶体的能带结构，$GaAs_{1-x}P_x$ 可能成为直接带隙半导体。



宽带隙半导体 wide-band semiconductor 室温下，Si 的带隙为 1.1eV，GaAs 的带隙为 1.43eV，一般把室温下带隙大于 2.0eV 的半导体材料归类于宽带隙半导体，宽带隙半导体在蓝、紫光和紫外光电子器件，高频、高温、高功率电子器件及场发射器件方面应用广泛。

狭带隙半导体 narrow-band semiconductor 室温下，Si 的带隙为 1.12eV，Ge 为 0.6eV。相对于 Si 和 Ge，一般把室温下带隙小于 0.5eV 的半导体材料。锑化物和 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 三元合金材料归类于狭带隙半导体，狭带隙半导体在红光和红外光光电子器件方面具有重要应用价值。

多晶硅 polycrystal silicon 由大量取向不同的小的硅单晶体构成的薄膜或体硅材料称为多晶硅。非掺杂的多晶硅具有很高的电阻率，一般为 $10^6\sim10^7\Omega cm$。多晶硅中由于大量晶粒

间界的存在形成缺陷态,使自由载流子的浓度减少,散射大大增加,迁称率减少,杂质扩散系数增加。

氢化非晶硅 amorphous Si:H 含有大量硅氢键的非晶硅称为氢化非晶硅即 a-Si:H 或非晶硅氢合金,a-Si:H 中含氢量达 3%～50%。a-Si:H 通常采用辉光放电法或溅射法制备,其电导及光电性质密切依赖于制备条件。a-Si:H 中的氢能够补偿非晶硅中大量存在的悬挂键,使其缺陷态密度大大降低,从而导致 a-Si:H 具有显著的掺杂效应,电导率可改变约 10 个量级。a-Si:H 具有比晶体硅更高的光电导响应,光电导与暗电导比值可达 10^4～10^5。a-Si:H 的光学带隙约 1.7eV,对整个太阳光谱的吸收系数大于 $10^4 cm^{-1}$,1μm 厚的 a-Si:H 薄膜可以实现对太阳光谱的完全吸收,因此它成为廉价太阳电池的基础材料。a-Si:H 的另一重要用途是用 a-Si:H 制作的薄膜场效应管作为液晶显示屏的开关矩阵。

杂质 impurity 杂质对半导体的性能起着决定性的影响。这不仅是因为在晶体的制备过程中很难避免杂质的混入,更主要的是为了控制半导体的性能制成有用的器件往往还要人为并且有控制地加入某些杂质。对完全纯净的半导体,一般在室温下只有少量的价带电子热激发到导带而形成电子空穴对,导电能力很弱,这种情况只要向半导体内掺入少量的杂质就能改变。其中一些杂质,离化能很小,在常温下就能电离,向导带提供电子,或接受价带电子,向价带提供空穴,从而使半导体成为以电子导电为主的 n 型半导体或以空穴导电为主的 p 型半导体。同时杂质本身成为带正电或负电的离子,这种杂质称为施主杂质或受主杂质。当杂质原子的价电子数和主晶格原子的相差两个以上时,原则上说,在半导体中也可以起施主或受主作用,但常常因为离化能较大,在常温下对半导体的载流子(电子和空穴的总称)浓度影响不大,常被称为深能级杂质。但是许多这样的杂质,即使数量很少,也能在半导体中起到有效复合中心作用,促进非平衡载流子的复合,减小非平衡载流子寿命,从而影响半导体的光电导、光吸收和光发射以及器件的开关参数。

双性杂质 amphoteric impurity 有些杂质在同一半导体中既可起施主作用,又可起受主作用,这种杂质称为双性杂质。杂质的双性行为的起因可以不同。一种情况是双性杂质在晶格中只占据一种位置,但能给出或得到电子而起施主或受主作用,对于这种情况一般受主能级在施主能级之上,因为只有杂质尚未给出电子时才谈得上接受电子。另一种情况是杂质在晶格中占据不同的位置,施主和受主分别由所占据的不同的晶格位置决定。

杂质能级 impurity level 半导体材料中的杂质使严格的周期性势场受到破坏,从而有可能产生能量在带隙中的局域化电子态,称为杂质能级。对于杂质和主晶格原子价电子相差 1 的施(受)主杂质,它们的离化能很小,通常只有十几～几十毫电子伏,在常温下就能电离而向导带(价带)提供电子(空穴),自身成为带正(负)电的电离施(受)主,通常称这些杂质能级为施(受)主能级。和主晶格原子的价电子相差大于 1 的杂质,在半导体中形成的杂质能级一般离导带底或价带顶较远,它们的施主或受主作用一般不明显,通常称这些杂质能级为深能级。靠近禁带中央的深能级往往是有效的复合中心,能促进非平衡载流子的复合,对半导体的光电和发光性能起重要作用。

受主 acceptor 在半导体带隙中间的能级,能够接受电子同时自身成为负离子的杂质称为受主杂质。被受主杂质所接受的电子的能量高于价带顶的能量,相应的能级称为受主能级。有些缺陷也可以形成受主中心。一种最简单的也是实际上最重要的受主杂质是类氢杂质。在锗、硅、Ⅲ-Ⅴ族化合物等重要的半导体材料中加入少一个价电子的元素(如在锗、硅中加入硼、铝,在Ⅲ-Ⅴ族化合物中加入Ⅱ族元素代替原来的Ⅲ族原子),它们就成为受主。

施主 donor 能够向晶体提供电子同时自身成为正离子的杂质称为施主杂质。当电子被束缚于施主中心时,其能量低于导带底的能量,相应的能级称为施主能级。施主向导带释放电子所需的最小能量称为施主电离能。

等电子掺杂 isoelectronic doping 与被替代

的基体原子具有相同价电子结构的替代原子的掺杂。等电子杂质虽然是电中性的，但由于其原子半径及电负性与被替代原子不同，因此产生的短程势起陷阱作用，能俘获电子（空穴），并成为负电或正电中心而吸引一个空穴（电子），形成束缚激子。相邻的等电子中心成对地相互作用，形成一系列束缚激子能级。在某些半导体材料中掺入等电子杂质，由于束缚于等电子陷阱的束缚激子是局域化的，因而使辐射复合的概率增大，发光效率有较大增加。这一原理在 GaP 和 GaAsP 发光二极管中已广泛使用。等电子掺杂有利于提高发光效率的另一个原因是等电子陷阱束缚的激子仅包含一个电子和一个空穴，因此复合时不会产生俄歇（Auger）过程（一种非辐射复合过程）。

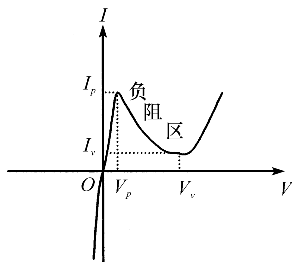
碳纳米管 carbon nanotube 由碳原子构成的网状纳米尺度半径的管状物为碳纳米管，分成单层和多层碳管。碳纳米管是 20 世纪 90 年代初被人类合成的一种新型人工结构材料，具有许多不同于石墨、金刚石、C_{60}等碳材料的物理、化学性质。现已发现其可应用于化学催化剂，纳米晶体管，场发射，高强度纤维等方面。人类至今尚未对碳纳米管的制备工艺技术和原理充分了解，因此碳纳米管是当前材料、物理、化学等领域十分活跃的研究课题。

三、半导体器件 *Semiconductor Device*

半导体二极管 semiconductor diode 利用半导体特性的两端电子器件。最常见的半导体二极管是 pn 结型二极管和金属半导体接触二极管。它们的共同特点是伏安特性的不对称性，即电流沿其一个方向呈现良好的导电性，而在相反方向呈现高阻特性。可用作为整流、检波、稳压、恒流、变容、开关、发光及光电转换等。利用高掺杂 pn 结中载流子的隧道效应可制成超高频放大或超高速开关的隧道二极管。另一类型半导体二极管则利用材料的体性质如热敏二极管、光电导二极管、微波二极管，为非结型二极管。

肖特基二极管 Schottky diode 用金属和半导体制成的面接触二极管，具有和 pn 结类似的单向导电性。由于肖特基二极管的正向电流主要是由半导体中的多数载流子进入金属所形成的，它是多数载流子器件。肖特基二极管中因没有少数载流子的注入和复合问题，故比 pn 结二极管的高频特性好。同时，由于没有扩散电容和正向导通电压低，故其开关速度也比 pn 结二极管高。肖特基二极管也称肖特基势垒二极管或简称为势垒二极管。目前已在微波通信及雷达装置中广泛应用于混频、检波、调制、超高速开关、倍频及低噪声参量放大等。

隧道二极管 tunnel diode 又名江崎（Esaki）二极管，一种两端半导体结型器件。此管是由日本人江崎于 1957 年发明的。它不具有普通的整流作用，在正向偏置下，正向电流一开始随电压的增加而迅速上升达到极大值，随后随电压的增大电流反而减小产生负阻现象。反向时，反向电流随反向偏压增大而迅速增加，相当于短路。这是由于在二极管的 p 区和 n 区均为重掺杂，通常称为隧道结，隧道结中势垒区很薄，约为 $10^{-2}\mu m$，是一般 pn 结的 1%。由于量子力学的隧道效应，n 区导带的电子可能穿过禁带到 p 区的价带，p 区价带电子也可穿过禁带到 n 区导带，从而产生隧道电流。这样使得在零偏附近和所有负偏条件下电流均能自由通过。由于它具有正向负阻特性，而且是利用多子隧道效应工作的，所以隧道二极管具有多种用途。它具有噪声低、工作温度范围大，可在极高频工作等优点，能在高频电路中用作放大、振荡和开关等的有源元件。



发光二极管 light emitting diode 用半导体材料制造的具有结型二极管结构的电致发光器件。目前广泛应用的发光二极管主要用Ⅲ-Ⅴ族二元或三元化合物制成。它主要利用pn结正向注入非平衡载流子的辐射复合而发光。除了pn结发光二极管,还有其他结构的,例如用不同禁带宽度的材料制成的异质结及双异质结结构,金属-半导体肖特基结构及金属-绝缘体-半导体(MIS)结构。Ⅱ-Ⅵ族化合物都是宽禁带直接带隙材料,是理想的发光二极管材料,但由于自补偿效应等原因,大部分不能制成两性导电的材料,因而尚无简单的方法获得pn结,这方面的研究还在继续。

发光效率 luminescence efficiency 发光材料把吸收的激发能转变为光能的能力称为发光效率。它是评价及选用发光材料的主要依据之一。根据不同的着重点,常用量子效率、功率效率和流明效率几种表达形式。量子效率表示发光材料发射的光子数与激发的吸收或注入的光子或电子数之比。量子效率又分为内量子效率与外量子效率,内量子效率是指发光材料内部发射的光子数与吸收或注入的粒子数之比。外量子效率是指出射到发光体外部的光子数与吸收或注入的粒子数之比。显然内量子效率大于外量子效率。功率效率表示总发射光的功率与总吸收光功率之比,即使量子效率大于1,功率效率总是小于1。流明效率(或称光度效率)是指发射的光通量(以流明为单位)与激发时输入的总功率之比。它在与人眼视觉有关的应用中特别重要。

发射光谱 emission spectrum 处于激发状态的固体发射光的波长及与之相对应的发光强度的谱线。由于测试系统中的光电探测器、单色仪和其他光学元件对不同波长光的光谱响应是不同的,因此通常把待测固体的发射与一已知相对光谱分布的光源(标准灯)在同一测量系统上进行比较,从而推得所测固体的相对发射光谱。

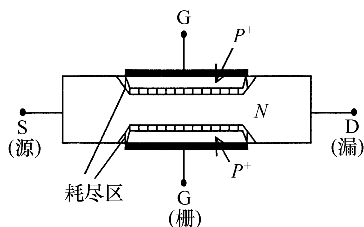
稳压二极管 Zener diode 稳压二极管是面结型硅二极管。它利用pn结工作在反向击穿状态时,击穿电压附近的电流变化很大,电压变化却很小的原理。在应用电路中串有限流电阻,使稳压管击穿后电流不超过允许值。这样,在反向偏压下,输出稳定的电压。

反向漏电流 inverse leakage current 流过处于反向工作的pn结的微小电流称为反向漏电流。理想pn结反向漏电流中还包括体内扩散电流与空间电荷区产生电流两部分,硅pn结空间电荷区产生电流起支配作用。反向漏电流的大小与组成pn结的半导体材料禁带宽度呈指数关系,反向漏电流中还包括表面漏电流,表面漏电流的大小与pn结制作工艺密切相关。

场效应晶体管 field effect transistor(FET) 场效应晶体管(FET)是利用输入电压的电场作用控制输出电流的一种半导体器件。与双极晶体管相比,FET有很多优点,主要是:FET是依靠多数载流子工作的器件,所以又称单极晶体管,它没有少子存储效应,适于高频和高速工作,且耐辐射性好;FET的输入阻抗高,实际上不需输入电流,所以在模拟开关电路、高输入阻抗放大器、微波放大器中获得广泛的应用;FET的制造工艺相对比较简单。场效应晶体管可分为结型场效应管(JFET)、肖特基势垒栅场效应管(MESFET)和绝缘栅场效应管(MOSFET)三大类。而JFET和MOSFET又可再分为p沟道和n沟道器件。三类场效应管都有一个半导体材料的沟道(电流通路),沟道两端各有一个电极:一个叫做源极,一个叫做漏极。各种场效应管都有一个施加控制电压或电场的栅极。在FET工作时,栅极电压的变化会引起导电沟道电性能变化,从而控制了源和漏之间的电流。场效应管由于输入阻抗大,噪音小,极限频率高抗辐射能力强和制造工艺简单,它已广泛应用于包括放大及数字电路在内的各种电路中。FET也是集成电路的关键元件之一。

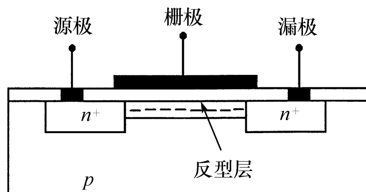
结型场效应晶体管 junction field effect transistor(JFET) 结型场效应晶体管(JFET)是通过外加栅极电压来改变栅极空间电荷区的宽度,从而控制沟道导电能力的一种场效应器件。如图所示,源极和漏极之间的导电沟道是导电率相当低的半导体材料。栅极与下面的导电半导体之间存在整流结。JFET的栅极一

般都加反向偏压，且栅结的耗尽层主要向沟道区扩展。改变栅结电压可以控制栅结耗尽区宽度，以改变导电沟道宽度，从而控制输出漏电流，在某一高反偏压下，沟道最终可被夹断。这类晶体管平常处于导通状态，在高反偏压下又可夹断。JFET 已广泛使用于小信号放大器、电流限制器、电压控制电阻器、开关电路和集成电路中。如果栅结为肖特基势垒结，这就制成肖特基势垒场效应管（MESFET）。这种场效应管的跨导高、工作频率高，是微波领域里的热门器件。由于 GaAs 中电子迁移率比硅中大 5 倍，峰值漂移速度大 1 倍，所以 GaAs MESFET 发展迅速。



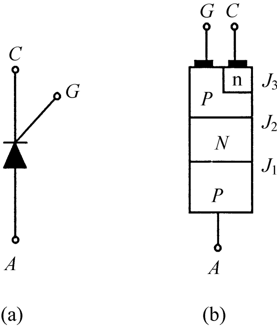
金属-半导体场效应晶体管 metal-semiconductor field effect transistor, MESFET 见“结型场效应晶体管”。

金属-氧化物-半导体场效应管 metal-oxide-semiconductor field effect transistor, MOSFET JFET 和 MESFET 两种场效应管工作原理都是利用两个反偏 pn 结（或肖特基结）控制沟道电流。如不用 pn 结，而由栅极上的外加电压透过一层绝缘体对沟道电流进行控制，这种结构中栅极与沟道之间是绝缘的，绝缘层可以选用 SiO_2、Si_3N_4 和 Al_2O_3 等，以使用 SiO_2 最为普遍。n 沟道 MOSFET 其基本结构如图所示。在 p 型衬底上扩散两个 n^+ 型区，分别是漏极和源极。中间部分是金属-绝缘体-半导体组成的 MOS 电容结构，绝缘层上的金属电极称为栅极。栅极上不加电压时，源和漏极之间由其周围的结绝缘着，故不通导。当栅极加上电压，栅下氧化层中产生电场，其电力线由栅电极指向半导体表面，外加电压将在半导体表面产生表面感应电荷。随着栅极电压的增加，半导体表面将由耗尽而反型，产生电子积累，从而形成一个感生的 n 型表面薄层，因为其导电类型与衬底的导电类型相反，故称此表面薄层为反型层。反型层成为连接源、漏极的沟道。改变栅压，可改变沟道中电子密度，从而改变沟道电阻。若衬底是 n 型半导体，则可构成 p 型沟道的 MOSFET。



硅可控整流器 silicon controlled rectifier (SCR) 简称可控硅。是一种三端四层晶体管，由 pnpn 四层半导体构成，它是一种可以控制的大功率半导体整流器。图(a)为其电路符号，图(b)为结构原理图。该器件内部有三个 pn 结。当可控硅加反向电压（阴极接正，阳极接负）时，结 J_1 和 J_3 处于反偏，只有很小的反向电流，器件处于反向阻断状态。当可控硅加正向电压且控制极不加电压时，结 J_1 和 J_2 处于正向偏置，而结 J_2 为反向偏置，所以器件也只流过很小的正向电流。当正向电压上升到转折电压时，电流突然增加，器件由正向阻断突然转变为导通。导通后，正向特性和普通二极管正向特性相似。但在很大正向电压下使其击穿导通，实际上是不允许的。使用中是把正向触发电压加到控制极 G 上，使可控硅导通，正向转折电压降低。触发电流愈大，正向转折电压就愈低。触发导通是在极短时间内完成的，一般不超过几微秒。导通后，即使去掉 G 板上的触发电压，器件仍可维持导通，控制极不再起作用。通常触发电压 1～5V，触发电流为几十至几百 mA。可控硅导通后，正向压降一般为 0.6～1.2V。SCR 的额定正向电流从 1A 到几百 A，反向额定电压可高达 2kV 以上，工作温度 150°以下。SCR 主要用于电力变换和控制，如可控整流、交流调压、逆变（直流→交流）、斩波调压（直流→可变直流）等。可以用微小的信号功率（100～200mA 电流、2～3V 电压）对大功率的电源（几百安电流、几

千伏电压)进行控制和变换。SCR 具有耐压高、容量大、效率高、控制灵敏等优点。缺点是过载能力和抗干扰能力较差,控制电路比较复杂。随着技术的发展,出现了双向可控硅、反向截止可控硅等派生元件,扩大了应用范围。可控硅又称晶体闸流管(简称晶闸管)。

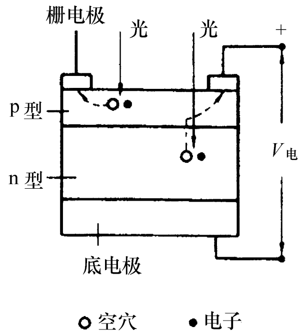


(a)　(b)

高电子迁移率晶体管 high electron mobility transistor 利用异质结或调制掺杂结构中二维电子气高迁移率特性的场效应晶体管。其低温、低电场下的电子迁移率比通常高质量的体半导体的场效应晶体管高 1000 倍,可实现高速低噪音工作。

异质结双极晶体管 heterojunction bipolar transistor 简称 HBT。将双极晶体管中的发射结做成异质结形成的晶体管称为异质结双极晶体管。双极晶体管中的异质结界面应做成突变结才能得到最高的少子注入效率。因为异质结宽带发射极的注入效率高,所以异质结双极晶体管的放大倍数将比同类型的普通双极晶体管高。如果不要求放大倍数十分高,则异质结注入比高的优点可利用来降低发射结的电容和基区的电阻,从而提高异质结双极晶体管的频率特性。如果将基区的组分做成渐变的形式,就相当于基区存在着一个等效电场,它将使注入的少子通过基区的渡越时间缩短,从而进一步提高异质结双极晶体管的频率响应。

太阳电池 solarcell 太阳电池能将太阳辐射能直接转换为电能。目前,所有航天器包括宇宙飞船、人造卫星、空间站、宇宙探测器和航天飞机等,几乎都采用太阳电池,以硅太阳电池为主,有单晶硅、多晶硅和非晶硅太阳电池三类。它们是利用了光生伏特效应,如图所示。当用适当波长的光照射非均匀半导体(pn 结等)时,由于内建场的作用,半导体内部产生电动势(光生电压),从而可输出电压或电流。这种由内建场引起的光电效应,称为光生伏特效应。同质 pn 结,异质 pn 结和肖脱基势垒均能产生光伏效应。除硅材料外,硫化镉、磷化铟、砷化镓和砷磷化镓等也能制成太阳电池,它们的光电转换效率高,消耗原料少,但造价高。



非晶硅太阳电池 amorphous silicon solar cell 利用对太阳光具有高吸收系数的非晶硅薄膜制作的太阳电池。通常采用 pin 结构、肖特基结构或多个 pin 结的叠层结构,其转换效率可达 10%至 20%左右,是一种廉价的能源。

电荷耦合器件 charge coupled device(CCD) 以集成电路形式制造的一种模拟移位寄存器。通过衬底表面势阱深度的控制,实现孤立电荷包在衬底中的存储与传输。根据时钟控制方式,CCD 分为三相 CCD 及两相 CCD。CCD 的应用很广,主要用于摄像、信息存储和信息处理三个方面。

半导体存储器 semiconductor memory 存储器是电子计算机中存放数据、指令、中间结果的一个重要部件。存储器的主要性能指标是存储容量和工作速度。半导体存储器是利用半导体器件的两种不同开关状态实现二进制代码存储的存储器。它通常包含存放大量二进制代码的存储单元矩阵,读写电路及控制电

路。半导体存储器具有容量大、速度快、体积小、可靠性强、成本低、使用方便等优点。半导体存储器分为两大类：双极型存储器和MOS型存储器。前者速度高，主要用于计算机中的高速缓冲存储器，后者集成度大、容量大、功耗低，用于电子计算机的内存储器。半导体存储器按功能主要分为随机存取存储器(RAM)和只读存储器(ROM)。RAM可随时读出或写入信息。ROM是用来储存固定数据和指令的。此外存储器还可分为挥发性和不挥发性存储器，前者在去掉电源时所存信息同时消失，后者则不会丢失。

半导体传感器 semiconductor sensor 能够把接收到的光、磁、热、力、化学物质变为可探测的电讯号的半导体器件。最主要的半导体传感器有：利用半导体压敏特性制造的压力传感器、利用晶体管参数的温度效应制造的温度传感器、电荷耦合传感器、色敏传感器、利用半导体Hall效应的磁传感器、利用半导体材料对化学环境的敏感性制造的化学传感器，例如离子敏感和气体敏感传感器。

半导体激光器 semiconductor laser 半导体激光器是全部由半导体材料来实现光学受激辐射的半导体光电子器件。半导体激光器一般由Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体多量子阱结构为基础形成的pn结构成，由具有不同光学常数的半导体多层膜形成光学共振腔，以实现光量子放大，由pn结电注入形成导带价带内的粒子数反转，形成受激辐射。半导体激光器在光通讯，光存储技术中广泛应用，是现代信息技术的基础。

集成电路 integrated circuit 由大量晶体管、二极管、电阻和电容构成的复杂电路，用以实现数字或模拟信号处理。若集成电路是做在同一块半导体衬底上，则称为半导体集成电路。若集成电路是由许多分立器件键合在绝缘衬底上而构成，则称为混合集成电路。此外，还有薄膜集成电路与厚膜集成电路。由于半导体集成电路远比其他集成电路发展迅速、应用广泛，因而人们常常将半导体集成电路与集成电路两个名词等同使用。目前研究工作最多、产量最大、应用最广泛的集成电路是硅集成电路。砷化镓集成电路在高速和微波应用领域有其特殊地位。集成电路按功能分为数字集成电路、模拟集成电路和微波集成电路。按器件分为双极型集成电路、MOS型集成电路及混合集成电路。从品种及产量上比较MOS集成电路都占主导地位。CMOS及BiC-MOS是MOS工艺中的主流品种。

超大规模集成电路 ultra large scale integrated circuit(ULSI) 包含1 000 000个以上晶体管的集成电路。

耿氏器件 Gunn device 耿氏器件是利用耿氏效应制作的一种能产生微波振荡的负阻器件。1963年Gunn首次报道了n型砷化镓单晶具有负阻特性的实验结果，证实了两年前Ridley等从理论上预期获得半导体负阻特性的可能性。此后人们开发出了具有实用价值的耿氏器件。耿氏器件除了可由砷化镓材料制作，也可用磷化铟、碲化镉、硒化锌或某些三元合金材料制备，其中砷化镓最易制成高纯材料，应用最广。

光敏电阻 photoresistor 光敏电阻是一种在光照条件下改变自身电导的半导体无结两端器件。其工作原理是光照激发产生非平衡载流子参与电导，造成半导体材料电阻下降。通过杂质电离产生的光电导称为杂质光电导，通过价带电子跃迁至导带产生的光电导称为本征光电导。制备光敏电阻的材料有：锗、硅、硒、硫化镉、硫化钴、碲镉汞等。

热敏电阻 thermistor 热敏电阻是利用半导体材料电阻率敏感于温度的特性制造的半导体器件。热敏电阻最主要的参数是电阻温度系数

$$\alpha_T = \left(\frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}T}\right)_T$$

其中R表示电阻值。半导体材料的电阻率通常随温度升高而减小，有负的温度系数，其数值一般为普通金属电阻温度系数的5～15倍。

短沟道效应 short channel effect 当金属–氧化物–半导体场效应晶体管(MOSFET)的沟道长度L缩短到可与源和漏耗尽层宽度之和($W_S + W_D$)相比拟时，器件将发生偏离长沟道(也即L远大于$W_S + W_D$)的行为，这种因沟道

长度缩短而发生的对器件特性的影响，通常称为短沟道效应。由于短沟道效应使 MOSFET 的性能变坏且工作复杂化，所以人们希望消除或减小这个效应，力图实现在物理上是短沟道的器件，而在电学上仍有长沟道器件的特性。

窄沟道效应 narrow channel effect 当金属–氧化物–半导体场效应晶体管（MOSFET）的沟道宽度窄到可与源和漏的耗尽层宽度相比拟时，器件将发生偏离宽沟道的行为，这种由窄沟道宽度引起的对器件性能的影响称为窄沟道效应。沟道宽度变窄导致阈值电压增加，是窄沟道效应的重要方面，这与衬底中耗尽区沿沟道宽度的横向扩展有关。沟道变窄使阈值电压增加与沟道长度变短使阈值电压减小的特性正好相反，因此在既是短沟又是窄沟的小尺寸 MOSFET 中这两种相反的阈值电压特性使阈值电压趋于保持不变或仅有极小的变化。

耿氏效应 Gunn effect 当在 n 型砷化镓单晶两端制作欧姆接触，并加上高电场后，发现当外加电场达到每厘米几千伏特的临界值时，出现很强的电流振荡现象，其频率在微波范围，这个现象称为耿氏效应。耿氏效应是电子在导带能谷间的转移引起的。当外加电场低于临界值时，电子主要占据在导带中能量最低的能谷中。如果在能量差别不大的较高能量处存在另一个能谷，并且高能谷中电子的迁移率低于低能谷电子的迁移率，则当电场超过临界值，电子从低能谷向高能谷转移时，使电子的平均迁移率降低，从而表现出负微分电阻。

四、半导体技术
Semiconductor Techniques

纳米技术 nanotechnology 纳米是 10^{-9}m，制备纳米量级尺度材料、器件、系统的微加工技术，模拟技术和表征分析技术称为纳米技术，是纳米电子学的技术基础。纳米技术是当前材料、物理、化学、信息等领域极为重视的研究开发领域，是当代高技术的重要组成部分。

离子注入 ion implantation 用离子加速器将各种离子注入半导体材料，从而改变半导体材料的电学、光学或其他物理性质的半导体工艺技术，称为离子注入技术。自从 20 世纪 70 年代以来离子注入技术在半导体器件制备工艺中获得了广泛应用，是半导体器件工艺的最主要技术之一。

离子束刻蚀 ion-beam etching 离子束刻蚀，也称为离子铣，它的主要原理是当定向高能离子向固体靶撞击时，能量从入射离子转移到固体表面原子上，如果固体表面原子间结合能低于入射离子能量时，固体表面原子就会被移开或从表面上被除掉。通常离子束刻蚀所用的离子来自惰性气体。为了保证刻蚀的均匀性，离子束密度必须均匀并且应具有相同能量。此外，系统内的压力必须足够低，以防止离子束被散射。离子束刻蚀的机构决定了这种刻蚀有好的各向异性，又因为粒子尺寸是离子或原子量级的，因而这种刻蚀也具有较高的分辨率。这种技术的主要限制是刻蚀过程引起温升，这将使光刻胶很难除掉。

外延 epitaxy 外延是一种晶体生长方法，它是在一定条件下使原子规则地排列在单晶衬底上，形成结构完整，与衬底取向相同，并有一定厚度的单晶层的方法。外延技术既可用于生长与衬底材料相同的单晶层（同质外延），亦可用于生长与衬底材料不同的单晶层（异质外延）。由于采用的方法不同，外延又可分为固相外延、液相外延、气相外延和分子束外延等。气相外延普遍应用在硅晶体管、硅集成电路和砷化镓微波器件、砷化镓集成电路的制造中；分子束外延在制备超晶格量子阱结构中有重要作用。

分子束外延 molecular beam epitaxy（MBE） 分子束外延是一种超高真空条件下的物理气相淀积方法。其工作原理是在超高真空系统中，使分子或原子束连续不断地撞击到被加热的衬底表面上而获得均匀外延层。在分子束外延过程中，各种成分的束强度可以分别控制。分子束外延的特点是生长速率相当低，典型的为 0.1～0.2μm/h，因而能精细控制生长层的厚度，可以生长极薄的外延层。

电子束蒸发 electron-beam evaporation 电子束蒸发是一种清洁的金属薄膜淀积工艺。

由热丝发射的电子经过聚焦、偏转和加速以后形成能量约为 10keV 的电子束，然后轰击放在有冷却水套的容器中的金属并使之蒸发。蒸发的金属在置于附近的衬底（如硅片）上淀积，从而获得有一定厚度的金属镀层。电子束蒸发具有沾污轻和适用范围广的优点，但不适用于多元合金及易被电子束分解的化合物。铝受电子束轰击激发出的特征 X 射线会对器件造成损伤。电子束还可能使真空室内残余气体和一部分蒸发的金属原子电离。电子束蒸发在半导体集成电路中的主要应用是引线金属化层的淀积。

钝化 passivation 在半导体工艺中，钝化是指在硅片或半导体器件芯片的表面淀积或生长特定的介质膜，以防止表面受环境沾污和以后的操作对硅片表面可能造成的损伤。半导体表面层的性质对于环境或与半导体表面接触的介质的性质是很敏感的。表面沾污离子、界面态电荷、介质层内的可动电荷和固定电荷都会影响半导体的表面电势，从而引起表面层中载流子的积累，耗尽，或者使表面层反型，并引起金属–绝缘体–半导体（MIS）结构电容–电压特性和半导体器件特性的变化。为了保证半导体器件工作的稳定性和可靠性，必须在半导体器件芯片表面覆盖某些经过选择的介质膜，使表面钝化。较早采用的钝化膜是热生长的二氧化硅，但是二氧化硅膜不能阻挡钠等碱金属离子的扩散。现在生产上更常用的是二氧化硅–磷硅玻璃复合膜、二氧化硅–氮化硅复合膜、二氧化硅–三氧化二铝复合膜或聚酰亚胺膜。上述与硅片直接接触的钝化膜通常称为一次钝化膜，为了改善钝化效果，有时芯片封装前还要再涂敷一次钝化膜，称为二次钝化膜。聚酰亚胺也可用于二次钝化。

化学气相淀积 chemical vapour deposition （CVD） 化学气相淀积是一种气体反应过程。在这个过程中，由某些选定气体的热诱导分解在衬底上形成某种介质层。在硅平面器件及集成电路中最常用的是淀积 SiO_2，Si_3N_4 和多晶硅。化学气相淀积也广泛用于半导体单晶薄膜的外延生长，特别是多层膜的外延生长。在光电子器件和微波器件的制作中尤其常用。CVD 方法视工作时反应室中气体压强不同分为常压、低压和超低压 CVD。根据化学反应能量提供方式不同可分为热分解、光加热、射频加热、热丝、光、等离子体增强和微波等离子体增强 CVD。按反应气源不同又分为卤化物、氢化物和金属有机化合物 CVD（MOCVD）。

刻蚀技术 lithographic technique 在半导体工艺中，按照掩模图形或设计要求对半导体衬底表面或表面覆盖薄膜进行选择性腐蚀或剥离的技术称为刻蚀技术。普通的刻蚀过程大致如下：先在表面涂敷一层光致抗蚀剂，然后透过掩模对抗蚀剂层进行选择性曝光，由于抗蚀剂层的已曝光部分和未曝光部分在显影液中溶解速度不同，经过显影后在衬底表面留下了抗蚀剂图形，以此为掩模就可对衬底表面进行选择性腐蚀。如果衬底表面存在介质或金属层，则选择腐蚀以后，图形就转移到介质或金属层上。由于曝光束不同，刻蚀技术可以分为光刻蚀（简称光刻）、X 射线刻蚀、电子束刻蚀和离子束刻蚀，其中离子束刻蚀具有分辨率高和感光速度快的优点，是正在开发中的新型技术。刻蚀工艺不仅是半导体器件和集成电路的基本制造工艺，而且还应用于薄膜电路、印刷电路和其他微细图形的加工。

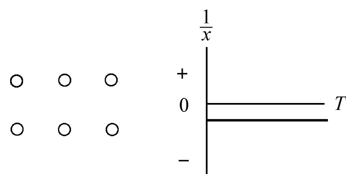
光刻技术 photolithographic technique 光刻是将反映半导体器件或集成电路芯片结构设计要求的掩模图形转移到衬底表面上的一种工艺技术。光刻过程一般包括几个步骤，先将衬底表面涂敷一层光致抗蚀剂，然后用紫外线或远紫外线透过掩模对抗蚀剂层曝光，经过化学显影以后，掩模图形就转移到抗蚀剂层上，再以抗蚀剂层为掩模，对其下面的介质（如二氧化硅、氮化硅等）膜、金属（如铝）膜、多晶硅膜或者单晶硅衬底表面进行选择性腐蚀，这样，图形又转移到这些加工层上，最后，去除作为腐蚀掩模的光致抗蚀剂层，完成一次光刻操作。根据曝光时掩模和硅片之间距离的不同，曝光方式可以分为接触式（掩模和硅片紧密接触）、接近式（掩模和硅片之间存在 20～25μm 间隙）和投影式等。投影式光刻中掩模远离硅片，掩模和抗蚀剂层不会损伤，因此掩模使用寿命长，光刻图形的缺陷少。光致抗蚀剂分正

性抗蚀剂和负性抗蚀剂两种。未曝光时可溶于显影液,曝光后不溶于显影液的为负性抗蚀剂;未曝光时不溶于显影液,曝光后才溶于显影液的为正性抗蚀剂。负性抗蚀剂与衬底黏附力强,感光灵敏度高,耐酸碱腐蚀,成本低,但分辨率较低,正性抗蚀剂的特点正与负性抗蚀剂相反。半导体集成电路的制造一般要经过多次光刻过程。光刻技术还应用于薄膜集成电路和印刷电路的制作。

Magnetism 磁　　学

一、基本磁性 Basic Magnetism

抗磁性 diamagnetism 又称逆磁性。所有物质都具有抗磁性。但是在许多情况下,物质的抗磁性会被较强的其他种类的磁性所掩盖。只有当原子或离子的子壳层全部被电子填满时,原子或离子不再具有本征磁矩,其他种类的磁性也就不再存在,抗磁性才能有效地显现出来。因此,抗磁性物质只有在受到磁场作用时,才能感应出一个较弱的磁化强度,其方向和磁场方向相反。所以,这类磁性的特点是磁化率 $\chi<0$, χ 的值为 $10^{-5}\sim10^{-6}$。一般,其磁化率不随温度而改变,如图所示。此外,有一些金属,如锑、铋、锌等,它们的抗磁磁化率在熔点附近有明显变化,即高于熔点时, χ 值较小,而低于熔点时,则较大;在极低温度下, χ 会随磁场强度的增大出现周期性的变化,且和磁场是沿平行于主轴还是垂直于主轴施加的方式有关,这种抗磁性称为反常抗磁性。



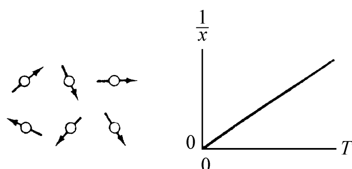
抗(逆)磁性

顺磁性 paramagnetism 当组成物质的原子或离子的内部子壳层未被电子填满的情况下,这些原子或离子便具有稳定的固有磁矩。如果这些磁性原子或离子在物质中相距较远,它们之间的相互作用可以忽略,或者相互之间的交换作用远小于热运动作用,则由于热运动的破坏作用造成原子或离子磁矩在空间的取向随时间而改变,因此物质的总磁矩为零。在磁场作用下,由于磁场对磁矩的力矩作用,使每个原子磁矩程度不等地朝磁场方向转动,从而沿磁场方向有一净的磁化强度产生。这样,磁化率 $\chi>0$,同时 χ 值较小,一般为 $10^{-4}\sim10^{-5}$。具有这种特点的磁性称为顺磁性。

对于大多数顺磁盐类,顺磁性物质的磁化率随温度的变化关系服从居里定律,即

$$\chi = C/T$$

式中, C 为居里常数, T 是热力学温度,如图所示。



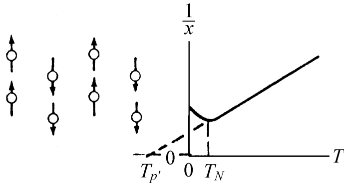
顺磁性

金属中的导电电子也具有顺磁性,通常称为泡利顺磁性。它们在温度不太高时,顺磁磁化率与温度基本无关。

反铁磁性 antiferromagnetism 在有些物质内部,存在由位于不同位置的磁性离子所组成的且互相贯穿的两种磁子晶格,在每一个子晶格内部,离子的磁矩是平行排列的,但两个子晶格中的磁矩数值相等、彼此之间呈反平行排列,这种物质的磁性称为反铁磁性。具有反铁磁性的物质是反铁磁性物质。这种磁性的特点是 $\chi>0$,但 χ 值较小。反铁磁性物质中这种磁矩的有序排列只有在奈耳温度以下才能存在。当温度高于奈耳温度时,物质从反铁磁性转变为顺磁性。这时,磁化率随温度的变化服从居里–外斯定律,即

$$\chi = C/(T + T_{p'})$$

式中，$T_{p'}$称为顺磁居里温度，为一负值。如图所示。图中 T_N 为奈耳温度。



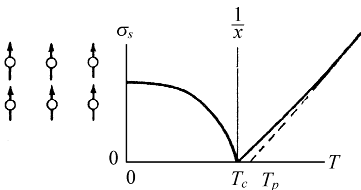
反铁磁性

铁磁性 ferromagnetism 有一类物质，其内部的原子磁矩之间由于强烈的交换作用而平行排列。随着温度的升高，热运动加剧，它们极力破坏磁矩的平行排列。当交换作用和热运动的作用相等时所对应的温度称为居里温度 T_c，这时，原子磁矩彼此之间趋于混乱排列。在受到磁场作用时，磁化率 $\chi>0$，且数值非常大，可高达 $10\sim10^6$，磁化率随磁场的变化关系复杂。这类磁性称为铁磁性。当温度高于居里温度时，铁磁性将消失，并转变为顺磁性。在远高于居里温度的情况下，磁化率服从居里–外斯定律，即

$$\chi = C/(T - T_p)$$

式中，T_p 称为顺磁居里温度，T_p 一般高于铁磁居里温度 T_c。

亚铁磁性 ferrimagnetism 和反铁磁性类似，亚铁磁性物质内部也存在两个互相贯穿的磁子晶格，在每一个磁子晶格内部，离子的磁矩是平行排列的，两个磁子晶格的离子磁矩彼此之间呈反平行排列，但是，由于两个磁子晶格的磁性离子数目不等，因此造成两个磁子晶格的磁矩并不相等。具有这种特点的磁性称



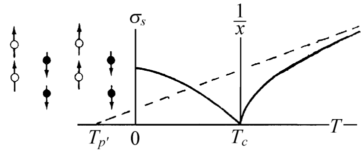
铁磁性

为亚铁磁性。实质上，它是未抵消的反铁磁性。亚铁磁性物质总的磁化强度等于两个磁子晶格上的磁化强度之差，所以，一般情况下，它们的自发磁化强度数值上低于强铁磁性物质的相应值。

亚铁磁性的 $\chi>0$，χ 值较大，可高达 $10\sim10^4$。当温度上升到居里温度时，物质磁性从亚铁磁性转变为顺磁性，磁矩的有序排列也就随之消失。在温度远高于居里温度时，磁化率随温度的变化服从居里–外斯定律

$$\chi = C/(T + T_{p'})$$

式中，$T_{p'}$ 称为顺磁居里温度，为一负值。但是，在居里温度附近，磁化率随温度的变化不服从居里–外斯定律。



亚铁磁性

超顺磁性 superparamagnetism 如果磁性材料是一单畴颗粒的集合体，对于每一个颗粒而言，由于磁性原子或离子之间的交换作用很强，磁矩之间将平行取向，而且磁矩取向在由磁晶各向异性所决定的易磁化方向上，但是颗粒与颗粒之间由于易磁化方向不同，磁矩的取向也就不同。现在，如果进一步减小颗粒的尺寸即体积，因为总的磁晶各向异性能正比于 K_1V，热扰动能正比于 kT（K_1 是磁晶各向异性常数，V 是颗粒体积，k 是玻尔兹曼常数，T 是样品的绝对温度），颗粒体积减小到某一数值时，热扰动能将与总的磁晶各向异性能相当，这样，颗粒内的磁矩方向就可能随着时间的推移，整体保持平行地在一个易磁化方向和另一个易磁化方向之间反复变化。从单畴颗粒集合体看，不同颗粒的磁矩取向每时每刻都在变换方向，这种磁性的特点和正常顺磁性的情况很相似，但是也不尽相同。因为在正常顺磁体中，每个原子或离子的磁矩只有几个玻尔磁子，但是对于直径为 5nm 的特定球形颗粒集合体而言，每个颗粒可能包含了 5000 个以

上的原子，颗粒的总磁矩有可能大于10000个玻尔磁子。所以把单畴颗粒集合体的这种磁性称为超顺磁性。

超顺磁性行为有两个最重要的特点：一是如果以磁化强度 M 为纵坐标，以 H/T 为横坐标作图（H 是所施加的磁场强度，T 是绝对温度），则在单畴颗粒集合体出现超顺磁性的温度范围内，分别在不同的温度下测量其磁化曲线，这些磁化曲线必定是重合在一起的。二是不会出现磁滞，即集合体的剩磁和矫顽力都为零。

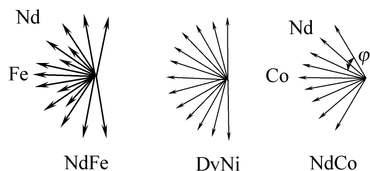
对于磁性颗粒集合体来说，有两个物理量非常重要：一是出现超顺磁性的临界尺寸（直径）D_p。如果颗粒系统的温度保持恒定，则只有当颗粒尺寸 $D \leqslant D_p$ 才有可能呈现超顺磁性。该直径小于单畴颗粒的临界直径。二是截止温度 T_B，对于足够小的磁性颗粒，存在一特征温度 T_B，当温度 $T < T_B$ 时，颗粒呈现强磁性（铁磁性或亚铁磁性）；$T \geqslant T_B$ 时，颗粒呈现超顺磁性。

变磁性 metamagnetism　有一些反铁磁性物质，在较低的磁化场作用下，其磁化强度随磁场的变化很小，但是当磁场强度增大到一定大小时，会从反铁磁性突然变为铁磁性，磁化强度急剧上升，最终趋近饱和。类似于这种物质磁性在磁场作用下会突然从反铁磁性转变为铁磁性或者从铁磁性转变为反铁磁性的现象称为变磁性。例如，$FeCl_2$ 和 $MnAu_2$ 都是具有这种变磁性的典型物质。

混磁性 mictomagnetism　一些由磁性金属和非磁性金属组成的合金在磁性元素的含量超过某一临界值时，低温下往往会出现几种磁有序（如铁磁性、反铁磁性、亚铁磁性等）共存，因此称为混磁性。例如，Fe-Au合金就是一种具有混磁性的合金，Fe含量的临界值约为12%（原子）。

对于钴锰和镍锰合金，当锰含量在一定范围时，常由基体和弥散分布于基体内的铁磁性团簇所组成。在低温下，基体原子自旋的空间取向是混乱的，而每一个确定的自旋取向又是完全被冻结的；铁磁性团簇内所包含的自旋互相平行排列且有择优取向。同时，基体自旋和磁性团簇的自旋相互之间存在交换耦合。在宏观磁性上，这类合金的低温交流磁化率在某一温度 T_f 时出现最大值。如果将合金在磁场中冷却到低于 T_f 的温度，则合金的磁化曲线将发生位移，使其相对于坐标原点不再对称，同时，只有单方向的剩磁存在。这种磁性也属于混磁性。如成分为 $Co_{1-x}Mn_x$（x=33～0）的磁性合金就是典型的混磁性合金。

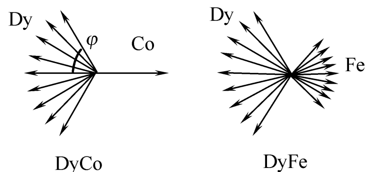
散铁磁性 asperomagnetism　在一些由轻稀土元素和铁、钴等元素组成的非晶态合金中，由于Fe-Fe原子或Co-Co原子之间的交换作用很强，致使这些原子磁矩都是平行排列的。与此同时，这些原子和轻稀土原子之间存在的交换作用为正而且也较强，所以轻稀土原子总的合成磁矩和铁、钴原子的磁矩的取向相同，和铁磁性相似。但是，轻稀土原子的磁矩取向具有分散性，即分布在一顶角为 2φ 的圆锥体内，φ 的大小随非晶态合金的成分变化。例如，对Nd-Co合金，$\varphi < \pi/2$；对NdFe合金，$\varphi > \pi/2$；对 $DyNi_3$，$\varphi = \pi/2$（Ni的原子磁矩为0）。具有这两方面特性的磁性称为散铁磁性。



散铁磁性

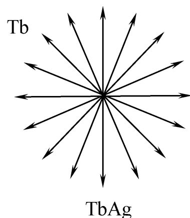
散亚铁磁性 sperimagnetism　在一些由重稀土元素和铁、钴等元素组成的非晶态合金中，由于Fe-Fe原子或Co-Co原子之间的交换作用为正且很强，致使这些原子磁矩基本上都是平行排列的。稀土原子磁矩的空间取向具有分散性，即分布在顶角为 2φ 的圆锥体内。由于重稀土原子与铁、钴原子的交换作用为负，所以合金中的稀土原子的总磁矩和铁（或钴）原子的总磁矩呈反平行排列，具有这种特点的磁性称为散亚铁磁性。在这些非晶态合金中，由于Co-Co原子之间的交换作用大于Fe-Fe原子之间的交换作用，造成稀土-钴非晶态合金中的钴原子自旋呈共线排列，而稀土-

铁非晶态合金中的铁原子自旋取向也有小的分散性。



散亚铁磁性

散反铁磁性 speromagnetism 在一些由稀土元素和非磁性的铜、银或金等元素所组成的非晶态合金中，由于受局域晶场和自旋-轨道耦合的作用，合金具有较强的局域各向异性。每一个稀土原子的磁矩在形成非晶时已经基本固定在一定的方向上，由于局域各向异性较强，且远大于稀土原子之间的交换相互作用，它们的自旋取向除了受热运动影响会在平衡位置附近作微小振动外，整体看来，在空间的取向是混乱分布的。如果把稀土自旋取向综合在一个球面体的图形里，从球心指向球面上任何一点的矢量就代表了合金中这些自旋的取向，具有这种特点的磁性称为散反铁磁性。



散反铁磁性

寄生铁磁性 parasitic ferromagnetism 又称倾斜磁性。有一些反铁磁体，通常在奈耳温度以下会呈现较弱的自发磁化。这是因为组成反铁磁体的两个磁子晶格中离子磁矩的取向在无外磁场作用下呈非共线结构，即两者不是完全反平行，而是偏离 180°一个很小的角度，从而使总磁矩不为零，表现出很弱的铁磁性，好像是“寄生”在反铁磁性中的一种磁性，所以称为寄生铁磁性。

二、磁 效 应
Magnetic Effects

磁热效应 magnetothermal effect 顺磁物质和强磁性物质由于外磁场的改变造成其磁化状态发生变化，从而导致物质温度改变的现象称为磁热效应，或磁卡效应。

根据热力学理论，熵是反映一给定的系统内部无序程度的物理量。系统越是无序，其熵越大。对磁性物质而言，反映其内部磁矩分布有序还是无序的参数叫磁熵。当一种物质没有受到磁场作用时，内部的原子或离子磁矩的取向分布无序程度较高，磁熵较大。一旦受到磁场作用，随着磁场的逐步增大，物质内部的磁矩将逐渐转向平行磁场方向排列，因此无序程度减小，磁熵也就相应减小。如果撤去磁场，磁矩取向的有序程度降低，磁熵又增大。热力学理论证实，定磁场下物质磁化强度随温度的变化率等于恒定温度下磁熵随磁场强度的变化率，即服从 Maxwell 关系

$$(\partial S/\partial H)_T = (\partial M/\partial T)_H \tag{1}$$

另外，如果物质系统与外界不存在热交换(绝热)，则等熵条件下系统温度随磁场的变化率和定磁场下磁化强度随温度的变化率有如下关系成立

$$(\Delta T/\Delta H)_s = -T/C_H \cdot (\partial M/\partial T)_H \tag{2}$$

式中，C_H 和 T 分别是物质的定磁场热容和绝对温度。综合式(1)和式(2)，可以看到，对于一绝热系统，在磁场强度改变 ΔH 时，必将引起系统磁熵的改变(简称磁熵变)ΔS，从而导致物质温度发生改变 ΔT。这就是磁热效应的热力学原理。

利用顺磁物质和铁磁物质的磁热效应，通过绝热退磁，已经获得了低温和极低温。目前，人们正致力于实现室温磁致冷。

磁卡效应 magnetocaloric effect 见“磁热效应”。

磁声效应 magnetoacoustic effect 磁性材料内部由于自旋波(磁振子)和声波(声子)发生相互作用而在两者之间产生能量交换或互相

激发的现象称为磁声效应。

磁性材料受到磁场作用会造成尺寸的变化(磁致伸缩)引起内部原子的位移或晶格振动，与此同时，原子的磁矩运动激发了自旋波。最简单的情况是当自旋波波矢 k_m 很小(即波长很长)时，频散关系是非线性的，可表示成

$$\omega_m = \gamma(H_{eff} + \alpha k_m^2)$$

而对晶格振动的弹性波，频散关系是线性的

$$\omega_e = v_e k_e$$

式中，ω_m、k_m 和 ω_e、k_e 分别是自旋波和弹性波的角频率和波矢，γ 是旋磁比，H_{eff}是内部等效磁场强度，α 是系数，v_e 是弹性波在磁性材料中的传播速度。在 ω(纵坐标)-k(横坐标)关系图上，自旋波呈抛物线关系，后者是通过零点的直线。当两者之间没有相互作用时，这两种波可互相穿越。但是，当 $\omega_m = \omega_e$，$k_m = k_e$ 时，两种波产生相互作用，在 ω-k 图上，原来的两条频散曲线将互相“推开”，形成一交叉区域。在这一区域内，自旋波可激发出弹性波，弹性波也可激发出自旋波，这种现象称为磁声共振。

一般来说，反铁磁体的磁声效应比铁磁体中要更明显，这是因为反铁磁体中的磁弹性耦合可通过磁子晶格之间的交换作用而得到加强，进而导致一些非线性磁声效应(如倍频、波形、谐波等)的出现。

磁弹效应 magnetoelastic effect 磁性材料在外加磁场改变时伴随有力学性能，如弹性、体积、长度等发生相应改变的现象称为磁弹效应或磁力效应。如线磁致伸缩、体磁致伸缩、磁声效应、压磁效应、因瓦效应、艾林瓦效应、爱因斯坦-德哈斯效应等都属于磁弹效应。

磁力效应 magnetomechanical effect 见“磁弹效应”。

磁光效应 magneto-optical effect 磁性物质在磁场作用下，或其本身的磁化状态发生变化时，造成穿过其或由其反射的光的特性发生改变的现象称为磁光效应。

法拉第磁光效应 Faraday magnetooptical effect 1845 年，法拉第发现线偏振光通过透明磁性体或薄膜时，如沿着光的传播方向施加磁场，则透射光将变成椭圆偏振光，其长轴相对于原入射光的偏振方向将发生旋转，这一现象称为法拉第磁光效应。

利用磁性材料的法拉第磁光效应，可以制成磁光器件或用于磁光存储。

克尔磁光效应 Kerr magneto-optical effect 1876 年，克尔发现线偏振光从不透明的磁性体或薄膜表面反射时，在磁场作用下，反射光变成椭圆偏振光，其长轴相对于原入射光的偏振方向将发生旋转，这一现象称为克尔磁光效应。根据磁场和磁性体或薄膜表面的相对取向关系，克尔效应可分为以下三种类型：

(1)极克尔效应：相应于磁场垂直于磁性体或薄膜的表面的情况。

(2)纵向克尔效应：相应于磁场平行于磁性体或薄膜的表面和光的入射面的情况。

(3)横向克尔效应：相应于磁场平行于磁性体或薄膜的表面和垂直于光的入射面的情况。

克尔旋转角的大小与磁场强度、材料的磁导率和介电常数有关。

利用磁性材料的克尔磁光效应，可以制成磁光器件或用于磁光存储。

科顿-穆顿效应 Cotton-Mouton effect 1907 年，科顿和穆顿发现光在通过铁磁体或顺磁体时，如果在垂直于光传播方向上加一磁场，则会呈现双折射现象，透射光被分为寻常折射光和反常折射光两支，这一现象称为科顿-穆顿效应。

压磁效应 piezomagnetic effect 磁性材料在磁场的作用下，由于内部磁化状态的相应变化，其尺寸和体积会随磁场强度的增大而发生变化从而表现出磁致伸缩效应；反过来，如果磁性材料仅受到一张应力或压应力的作用，则把在这种应力作用下由于尺寸的变化引起材料内部磁化状态变化的现象称为压磁效应。它是磁致伸缩效应的逆效应。有时，也把材料的磁致伸缩及其逆效应称为广义的压磁效应。

磁电阻效应 magnetoresistance effect 材料的电阻(率)随着外加磁场的变化而变化的现象称为磁电阻效应。它属于电流磁效应的一种。材料磁电阻效应的大小用不同磁场下电阻(率)的变化率 MR 来表示。通常，MR 有以下两种定义：

(1)$MR=[\rho(H)-\rho(0)]/\rho(0)$

(2)$MR=[\rho(H)-\rho(0)]/\rho(H)$

式中，$\rho(H)$和 $\rho(0)$分别是材料在磁场强度为 H 和零时的电阻率。根据第一种定义，MR 的最大值为 100%；根据第二种定义，MR 值可大于 100%。

寻常磁电阻效应 ordinary magnetoresistance effect　通常的非磁性金属在磁场的作用下电阻会随磁场而改变。对于一通有电流的非磁性金属直导线而言，如果用 $\rho_{/\!/}$和 $\rho_{\perp}$分别表示磁场 H 平行于和垂直于导线(或电流)方向的电阻率，则可发现 $\rho_{/\!/}<\rho_{\perp}$，且两者均随磁场强度的增大而增大，它们的改变量 $\Delta\rho_{/\!/}$和 $\Delta\rho_{\perp}$近似与 H^2 成正比，这种现象称为寻常磁电阻效应。这种效应的产生是由于导线中的运动电子在洛伦兹力作用下改变了运动轨道所致。

各向异性磁电阻效应 anisotropic magnetoresistance effect　一些磁性金属和合金同时在磁场和电流作用下，随着磁场强度的增大，发现磁场平行于电流方向时的电阻率 $\rho_{/\!/}$大于磁场垂直于电流方向时的电阻率 $\rho_{\perp}$，即 $\rho_{/\!/}>\rho_{\perp}$，同时两者随磁场增大的变化量 $\Delta\rho_{/\!/}<0$，$\Delta\rho_{\perp}>0$，具有这种特点的磁电阻效应称为各向异性磁电阻效应。这一效应的大小有以下两种表示方法：

(1)定义 $\Delta\rho_{AMR}=\rho_{/\!/}(0)-\rho_{\perp}(0)$反映效应的大小。式中，$\rho_{/\!/}(0)$和 $\rho_{\perp}(0)$分别是高磁场下的 $\rho_{/\!/}$和 $\rho_{\perp}$外插到零磁场时的电阻率值。$\Delta\rho_{AMR}$越大，各向异性磁电阻效应越大。

(2)用 $\Delta\rho_{AMR}/\rho_{AV}$反映效应的大小。式中，$\rho_{AV}$是电阻率的平均值，定义如下：

$$\rho_{AV}=(\rho_{/\!/}+2\rho_{\perp})/3。$$

对于常见的铁磁金属铁和钴，$\Delta\rho_{AMR}/\rho_{AV}$值很小，如在 5K 温度下，约为 1%。对 $Ni_{81}Fe_{19}$合金，低温下该值约为 15%，室温时为 2.5%，相应的饱和磁场小于 0.8kA/m。

巨磁电阻效应 giant magnetoresistance effect

1988 年，法国巴黎大学 Fert 等人在研究由 Fe 层和 Cr 层组成的多层膜的电子输运性质时，发现在保持总层数为 30 层和 Fe 层厚度为 3nm($1nm=10^{-9}m$)不变的前提下，当非磁性 Cr 层厚度从 1.8nm 减小到 0.9nm 时，4.2K 温度和 2 特斯拉磁场强度下的电阻 $R(2T)$降到零磁场下的电阻 $R(0)$的一半左右，即电阻的变化率可高达 50%，该值比通常的磁性金属的磁电阻变化率(约 2%)要高得多，因此，被命名为巨磁电阻效应。

为了表征薄膜的磁电阻效应的特点，根据外加磁场和流经薄膜的电流的相对取向的不同，可以定义下面三种不同的电阻率：

(1)纵向电阻率 $\rho_{/\!/}$：这是磁场和电流沿膜面施加且互相平行的情况下测得的电阻率。

(2)横向电阻率 ρ_{T}：这是磁场和电流沿膜面施加且互相垂直的情况下测得的电阻率。

(3)垂直电阻率 $\rho_{\perp}$：这是磁场垂直于膜面而电流沿膜面施加的情况下测得的电阻率。在巨磁电阻效应的情况下，这三种电阻率均随磁场的增大而减小，即磁电阻的变化率 MR 为负值(MR 的定义参见“磁电阻效应”)。此外，如排除薄膜退磁因子的影响，则有

$$\Delta\rho_{/\!/}/\rho_{/\!/}\approx\Delta\rho_{T}/\rho_{T}\approx\Delta\rho_{\perp}/\rho_{\perp}。$$

除了磁性多层膜外，1992 年人们还在由磁性金属颗粒和非磁性金属基体组成的磁性颗粒膜(如 Co-Ag、Co-Cu 等)中也发现了较大的巨磁电阻效应。

隧道结巨磁电阻效应 giant magnetoresistance effect of tunnelling junction　在量子力学中，一层绝缘体夹在两导体之间，绝缘层可以看成是一个方形势垒。即使电子的能量低于势垒高度，只要绝缘层的厚度不是无穷大，也会有概率穿越此势垒产生导电，这种现象称为隧道效应。1975 年，Slonczewski 设想如果做成一个“铁磁性金属/非磁性绝缘体/铁磁性金属”隧道结，则当两铁磁层磁化方向相互平行时，位于一铁磁层中多数或少数自旋子带的电子可分别进入另一铁磁层的多数或少数自旋子带的空态；但是当两铁磁层磁化方向反平行时，情况将有不同，一铁磁层的多数自旋子带中的电子自旋将与另一铁磁层的少数自旋子带电子的自旋相平行。于是，在隧道电导过程中，这一铁磁层的多数自旋子带的电子必须去占据另一铁磁层少数自旋子带的空态。结果，

就造成隧道结的电导和绝缘层两侧的铁磁层的相对磁化方向紧密相关。同年，Julliere 确实在 Fe/Ge/Co 隧道结中发现了这种现象，电导率在 4.2K 温度下的相对变化率可达 14%。由于电导的相对变化率和电阻的相对变化率是相同的，所以目前定义电阻(率)的相对变化率为磁隧道结的巨磁电阻值 TMR：

$$\mathrm{TMR} = \Delta R/R_{\uparrow\downarrow} = (R_{\uparrow\uparrow} - R_{\uparrow\downarrow})/R_{\uparrow\downarrow}$$

式中，$R_{\uparrow\uparrow}$、$R_{\uparrow\downarrow}$分别表示两铁磁层的磁化强度为平行和反平行时的隧道结的磁电阻值。磁性隧道结最初时两铁磁层的磁化强度为反平行取向，在足够强的外磁场作用下使它们成为平行取向，可造成较大的电阻率的相对变化的现象称为隧道结的巨磁电阻效应。至今，人们已在许多隧道结中发现了巨磁电阻效应，例如，$Fe/Al_2O_3/Fe$、$CoFe/Al_2O_3/Co$ 隧道结的室温 TMR 值可高达 15.6%和 18%。

需要指出的是，除了上述隧道结的巨磁电阻效应外，近来在一些由铁磁金属颗粒和非磁性绝缘基体组成的颗粒膜，如 $Ni\text{-}SiO_2$、Co-Al-O 膜等以及钙钛矿型多晶锰氧化物中均显示了巨磁电阻效应，人们认为这与它们的铁磁颗粒(或晶粒)的磁化方向在磁场作用下发生改变，导致自旋极化电子穿过绝缘层或绝缘晶界时隧道电导改变而引起的隧道磁电阻效应有关。

庞磁电阻效应　colossal magnetoresistance effect　从 20 世纪 60 年代以来，在一些钙钛矿结构的锰氧化物中陆续发现了较大的磁电阻效应。这些化合物的分子式可写成 ABO_3。式中，A 是镧系稀土元素，B 是三价锰离子。1994 年，由于用二价碱土金属离子替代三价镧离子的锰氧化物薄膜中发现磁电阻的变化率

$$\mathrm{MR} = [\rho(\mathrm{H}) - \rho(0)]/\rho(\mathrm{H}) = 12700\%,$$

它比在磁性多层膜和颗粒膜中测出的巨磁电阻效应还要大得多，因此被称为庞磁电阻效应。

目前已知，除 ABO_3 型锰氧化物之外，一些钙钛矿型钴氧化物、绿焦石型等锰氧化物中也发现了较大的磁电阻效应。一般，人们将这些化合物中的磁电阻效应统称为庞磁电阻效应。

巨磁阻抗效应　giant magneto-impedance effect　1992 年日本 K. Mohri 等人发现，当一非晶合金丝上通以高频电流并沿其长度方向施加一直流磁场，其两端电感会随外加直流磁场的变化而显著变化。这一研究结果引起人们的极大兴趣。通常，一载有高频电流的合金丝可以等效于一电阻 R 和一电抗 X 的串联电路，其复数阻抗为

$$Z = R + \mathrm{j}X$$

如将一定频率下薄带在磁场强度为 H 和 H_{max}时的电阻 R 和电抗 X 分别记作 $R(\mathrm{H})$，$R(H_{max})$和 $X(H)$，$X(H_{max})$并定义电阻 R 和电抗 X 的相对变化 $\Delta R/R$ 和 $\Delta X/X$ 为

$$\Delta R/R = [R(H) - R(H_{max})]/R(H_{max}),$$

$$\Delta X/X = [X(H) - X(H_{max})]/X(H_{max}),$$

研究表明，一些经过适当热处理的零磁致伸缩的纳米晶合金薄带在这种高频圆周磁场和纵向直流磁场的作用下，则 $\Delta R/R$ 和 $\Delta X/X$ 两者均随直流磁场的变化而显著变化，这一现象称为巨磁阻抗效应。

由于经过适当热处理的零磁致伸缩的非晶态合金薄带在低直流磁场(如最大场为 100 奥斯特)和 1MHz 的高频电流作用下磁阻抗的变化率高达 300%以上，同时又有极大的灵敏度(1700%/Oe)，因此在磁传感器领域有着很大的应用前景。

霍普金森效应　Hopkinson effect　软磁材料的初始磁导率在居里温度附近，随着温度的升高，由于磁晶各向异性常数比饱和磁化强度更快地趋近于零而出现最大值的现象称为霍普金森效应。

电流磁效应　galvanomagnetic effect　通有电流的导体或半导体在磁场作用下会产生电场、电动势或温度差的现象称为电流磁效应。它的产生与运动电荷在磁场中受到的洛伦兹力以及这些运动电荷与晶格之间的相互作用有关、霍尔效应、埃廷豪森效应、汤姆孙效应、能斯特效应等都属于电流磁效应。从电流磁效应的分析可以获悉有关金属或半导体的能带结构和导电机理等有用信息。

霍尔效应　Hall effect　如果电流沿一导体或

半导体的 x 方向流动，同时在其 z 方向上施加一磁场，则沿 y 方向将会产生一电动势，称为霍尔电动势。相应地，沿 y 方向的横向电场强度 E_y 为

$$E_y = -Rj_xH_z$$

式中，R 是霍尔系数。这一效应称为霍尔效应。

汤姆孙效应 Thomson effect 1856 年，汤姆孙发现当一导体中沿 x 方向有电流流过，同时沿该方向存在温度梯度的情况下，导体将出现吸热或放热的现象，此现象称为汤姆孙效应。导体单位时间单位体积内吸收的热量 Q 和电流密度 j_x 和温度梯度 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}x$ 成正比，即

$$Q = \sigma j_x . \mathrm{d}T/\mathrm{d}x$$

式中，σ 是比例系数，叫做汤姆孙系数。

产生汤姆孙效应的原因是：当导体中两点之间存在温度差时，载流子会从热端向冷端扩散，形成热扩散流，于是导体中产生一温差电场；同时，在载流子移动过程中，因不同位置处温度不同，它们的总能量（包括动能和势能）会相应地发生变化，最终以热量的形式吸入或放出。

能斯特效应 Nernst effect 1886 年，能斯特和埃廷豪森发现在金属铋中如果沿导体的 x 方向和 y 方向的电流密度 J 为零，且沿 x 方向有一温度梯度 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}x$，而沿 z 方向加一外磁场 H_z，则随着载流子从热端向冷端扩散，沿 y 方向将产生一横向电场 E_y，其值等于

$$E_y = Q(-\mathrm{d}T/\mathrm{d}x)H_z$$

这一效应称为能斯特效应，式中的 Q 为比例系数，称为能斯特系数。

能斯特效应与运动载流子在磁场中受到的洛伦兹力有关。由于热扩散流和温差电场引起的漂移流所组成的载流子流在导体中运动，其中，热扩散流的能量高于漂移流的能量，两者移动方向相反。不同能量的载流子在移动过程中所受到磁场的洛伦兹力大小上是不一样的，结果造成载流子在导体中的偏转程度也就不一样，因此，沿 y 方向有一能斯特电场 E_y 出现。

埃廷豪森效应 Ettingshausen effect 如沿导体中的 x 方向有电流密度 J 通过，沿 y 方向施加磁场 H，则在 y 方向上将有一温度梯度 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}y$ 出现，它们的关系如下：

$$\mathrm{d}T/\mathrm{d}y = -PJ_xH_z$$

式中，P 是比例常数，称为埃廷豪森系数。这种在相互垂直的电流和磁场的作用下，沿横向产生温度梯度的现象称为埃廷豪森效应。由于沿 x 方向的漂移流在洛伦兹力的作用下，会在导体中建立一霍尔电场，而在导体中移动的载流子因能量不同，它们的漂移速度也不同（因动量弛豫时间依赖于能量），所以在磁场中受到的洛伦兹力也不同，因此对载流子而言，同时受到方向相反的洛伦兹力和霍尔电场力的作用。相应于一定漂移速度即一定能量的载流子，这两个力恰好抵消，它们沿 x 方向通过；而对大于或小于这一临界速度或临界能量的载流子，这两个力不会抵消，导致它们沿 $+y$ 或 $-y$ 方向运动，从而沿 y 方向有一温度梯度存在。

近藤效应 Kondo effect 当极少数磁性金属原子和非磁性金属基体组成稀释固溶体时，由于磁性原子相距较远，它们之间的交换作用可以忽略。但是，电子在输运过程中会受到磁性原子的磁散射，导致合金的电阻率在一定的温度下出现极小值，这种现象叫做近藤效应。这是由日本物理学家近藤于 20 世纪 60 年代初首先从理论上加以论证的。

三、磁学量与磁化过程
Magnetic Parameters and Magnetization Process

各向同性 isotropy 物体的物理性质不随测量方向的改变而改变的特性，称为各向同性。

各向异性 anisotropy 物体的物理性质随测量方向的不同而改变的特性，称为各向异性。

磁各向异性 magnetic anisotropy 物体的磁性，如磁感应强度、磁化强度等随测量方向的不同而改变的特性，称为磁各向异性。

磁晶各向异性 magnetocrystalline anisotropy 许多磁性材料都是晶体。实验发现，沿着晶

体中的不同方向使晶体达到饱和磁化所需要的饱和磁化场强度或磁化能量是不同的。这种与晶体结构的对称性有关的磁各向异性称为磁晶各向异性。

应力各向异性 stress anisotropy 磁性材料在应力(包括外应力和内应力)作用下,磁化强度的方向将会因应力性质的不同(张应力还是压应力)和饱和磁致伸缩系数的正负而改变,这种由应力作用而引起的磁各向异性称为磁应力各向异性。

对于立方晶系材料,如考虑均匀张力或压力 σ 作用的情况,单位体积的应力各向异性能为

$$F_\sigma = K'_0 - 3/2\,\lambda_{100}\sigma(\alpha_1^2\gamma_1^2 + \alpha_2^2\gamma_2^2 + \alpha_3^2\gamma_3^2) - 3\lambda_{111}\sigma(\alpha_1\alpha_2\gamma_1\gamma_2 + \alpha_2\alpha_3\gamma_2\gamma_3 + \alpha_3\alpha_1\gamma_3\gamma_1)$$

式中,γ_1、γ_2、γ_3 是应力的方向余弦,α_1、α_2、α_3 是磁化强度的方向余弦。λ_{100} 和 λ_{111} 分别是沿单晶体的[100]和[111]方向的饱和磁致伸缩系数。对于各向同性磁致伸缩的情况,$\lambda_{100} = \lambda_{111} = \lambda_s$,上式可简化为

$$F_\sigma = K_0 + 3/2\,\lambda_s\sigma\sin^2\theta$$

式中,θ 是应力方向和磁化强度方向之间的夹角。通常,定义应力各向异性常数为

$$K_\sigma = 3/2\,\lambda_s\sigma$$

由该式可知,根据 $\lambda_s\sigma > 0$ 还是 $\lambda_s\sigma < 0$ 可决定沿应力轴还是垂直于应力轴是易磁化轴。例如,对于一磁致伸缩系数为正的磁性材料,若其受到一张应力($\sigma > 0$)作用,则 $\lambda_s\sigma > 0$,由 F_σ 的简化式可知,$\theta = 0$ 或 180°时 F_σ 有最小值,即磁化强度沿应力轴取向,应力轴为易磁化轴;反之,若该材料受到一压应力($\sigma < 0$)作用,则 $\lambda_s\sigma < 0$,于是,$\theta = \pm 90°$时 $F_\sigma = K_0 - 3/2|\lambda_s\sigma|$ 为最小值,即磁化强度垂直于应力方向取向,即垂直于应力方向的轴为易磁化轴。

形状各向异性 shape anisotropy 当磁性体(颗粒)的形状为非球形时,由于沿各方向的退磁因子不同,在相同的外磁场作用下沿不同方向磁化所产生的退磁场不相同,因而磁性体相应的退磁能和磁化曲线也就不一样,这种由形状而造成的磁各向异性称为磁形状各向异性。

对于一长半轴为 a、短半轴为 b 的伸长形旋转椭球体,磁性体单位体积的形状各向异性能为

$$F_d = K_0 + 1/2\,\mu_0 M_s^2 (N_b - N_a)\sin^2\theta$$

式中,M_s 为饱和磁化强度,N_0 为真空磁导率,N_a、N_b 分别是沿椭球体长轴和短轴方向的退磁因子。θ 为椭球体的饱和磁化强度与长轴之间的夹角。通常,定义形状各向异性常数为

$$K_d = 1/2\,\mu_0 M_s^2 (N_b - N_a)$$

可以看出,当 $\theta = 0$ 或 180°,即沿长轴方向磁化时,F_d 有最小值,这就是说,单从形状各向异性考虑,伸长椭球体的长轴是易磁化轴。

感生各向异性 induced anisotropy 一些磁性材料可以通过磁场热处理、塑性形变(冷轧、冷加工)或者在利用蒸发或溅射法制备磁性薄膜期间施加一磁场等途径可在大块材料或薄膜内部沿着磁场方向或冷轧方向产生一新的易磁化轴,这种通过磁场、滑移作用而感生的磁各向异性分别称为磁场感生各向异性或滑移感生各向异性,统称为感生各向异性。相应的感生各向异性能为 $10^2 \sim 10^4 \mathrm{J/m^3}$.一般多表示成

$$F_K = K_0 + K_u\sin^2\theta$$

式中,θ 是磁化强度与磁场方向或与形变方向之间的夹角。K_0 为常数,K_u 为感生各向异性常数。

交换各向异性 exchange anisotropy 通常,在由铁磁相和反铁磁相(或亚铁磁相)组成的磁性材料中,由于两相界面处自旋之间的交换作用而导致的一种单向性各向异性称为交换各向异性。例如,将直径为 10～100nm 的 Co 的超细微粉表面涂上一薄层 CoO,前者呈铁磁性,后者呈反铁磁性。随后在 1 T 的磁场中从 CoO 的奈耳温度(293K)以上冷却到 77K,就会由于 Co/CoO 界面上自旋之间的交换作用而感生出这样的交换各向异性。这时,材料的宏观磁性有两个重要的特点:一是磁滞回线沿着横坐标 H 轴向左平移,使正、反方向上的矫顽力 H_c 值有很大差别($+H_c = 40\mathrm{kA/m}$, $-H_c = 290\mathrm{kA/m}$);二是在 77K 温度下测得的转动磁滞损耗 W_r 即使在磁场高达 1.6 mT 的情况下

仍然有很大的数值，而对一般材料来说，W_r 在高场下会减小到零。

交换各向异性能一般表示成

$$E_k = -K\cos\theta$$

式中，K 是交换各向异性常数，θ 是材料的饱和磁化强度 M_s 和冷却时所加磁场方向之间的夹角。由该式可以看出，当 $\theta=0$ 即 M_s 和冷却磁场同方向时交换各向异性能为最小值($-K$)，此方向为易磁化方向。

单轴各向异性 uniaxial anisotropy　只有一根易磁化轴的磁性晶体称为单轴晶体。沿该易磁化轴的正、反两个方向均为易磁化方向。这种晶体沿易磁化轴磁化时，相对于其他晶体方向而言，为了使其达到饱和磁化所需要的磁化能最小。具有这种特点的磁晶各向异性称为单轴各向异性。除此之外，一些磁性材料经过磁场热处理、应力热处理或机械加工后，也会在材料内部感生出一易磁化轴，从而具有单轴各向异性。

对于具有六角密堆结构的晶体材料，单位体积的单轴各向异性能可表示成

$$F_k = K_0 + K_1\sin^2\theta + K_2\sin^4\theta + K'_3\sin^6\theta + K_3\sin^6\theta\cos 6\phi$$

式中，θ 是晶体的磁化强度 M_s 方向与 C 轴(垂直于六角平面的对称轴)之间的夹角，ϕ 是 M_s 在六角平面内投影的方位角，K_0、K_1、K_2、K'_3、K_3 是常数，称为磁晶各向异性常数。对于感生的单轴各向异性能一般多表示成

$$F_k = K_0 + K_u\sin^2\theta$$

表面各向异性 surface anisotropy　磁性材料表面的原子和体内原子处于一种完全不同的环境中。对于立方晶体而言，体内原子所处的环境具有立方对称性，但表面原子只受到材料一侧原子的作用，另一侧则暴露在空气中，显然失去了立方对称性。因此，表面原子之间的相互作用是各向异性的。研究表明，单位表面积所具有的表面各向异性能可表示成：

$$F_s = K_s\cos^2\theta$$

式中，θ 是磁化矢量 M 和表面法线之间的夹角。随着材料维度的降低，表面各向异性能对总的各向异性能的贡献增大。在薄膜或超细微粒中，这种表面各向异性的影响对于解释有关磁现象，如表面自旋钉扎造成的效应十分重要。

磁晶各向异性能 magnetocrystalline anisotropy energy　对于六角晶系，单位体积的磁晶各向异性能可表示成

$$F_k = K_0 + K_1\sin^2\theta + K_2\sin^4\theta + K_3\sin^6\theta + K'_3\sin^6\theta\cos 6\phi$$

式中，K_0 是常数，K_1、K_2、K_3、K'_3 代表了磁晶各向异性能变化的大小，称为磁晶各向异性常数。θ 和 ϕ 分别是磁化矢量 M_s 与晶轴[0001](即 C 轴)的夹角和 M_s 在六角平面上投影的方位角。

对于立方晶系，单位体积的磁晶各向异性能可表示成

$$F_k = K_0 + K_1(\alpha_1^2\alpha_2^2 + \alpha_2^2\alpha_3^2 + \alpha_3^2\alpha_1^2) + K_2\alpha_1^2\alpha_2^2\alpha_3^2$$

式中，K_0 是常数，K_1、K_2 是磁晶各向异性常数。α_1、α_2、α_3 是磁化矢量 M_s 与立方坐标系中三个坐标轴之间夹角的余弦。

在磁性晶体中，沿着不同的晶向具有不同的磁晶各向异性能。相应于磁晶各向异性能最小的晶轴称为易磁化轴，相应的晶向成为易磁化方向，而相应于磁晶各向异性能最大的晶轴和方向分别称为难磁化轴和难磁化方向。

易磁化方向和难磁化方向由磁晶各向异性常数的大小和正负符号所决定。

磁晶各向异性常数 magnetocrystalline anisotropy constants　见“磁晶各向异性能”。

磁晶各向异性等效场 magnetocrystalline anisotropy effective field　由于存在磁晶各向异性，在不加外磁场的情况下，磁性晶体中磁矩沿着易磁化方向排列。这就好比在易磁化方向上存在着一个磁场，正是在这个磁场的力矩作用下，把晶体内的磁矩牢牢地固定在这个方向上一样。这一假想的等效磁场称为磁晶各向异性等效场，或简称为磁晶各向异性场，用 H_A 表示。

对于单轴晶体，$H_A=2K_1/(\mu_0 M_s)$

对于立方晶体，$H_A=2K_1/(\mu_0 M_s)$

$(K_1>0)$

$H_A = -4K_1/(3\mu_0 M_s)(K_1 < 0)$

易磁化方向 easy magnetization direction 磁性单晶体在磁场中被磁化时，沿其不同方向加磁场使其达到饱和磁化所需要的磁场强度或磁化能量是不同的。对应于使晶体饱和磁化时最小饱和磁化场或最低磁化能量的方向称为易磁化方向。

难磁化方向 hard magnetization direction 磁性单晶体在磁场中被磁化时，沿其不同方向加磁场使其达到饱和磁化，所需要的磁场强度或磁化能量是不同的。对应于使晶体饱和磁化时最大饱和磁化场或最高磁化能量的方向称为难磁化方向。

磁致伸缩 magnetostriction 磁性材料在磁场中被磁化时，其尺寸或体积随着磁场的增大而改变的现象称为磁致伸缩。通常，把磁性材料尺寸随磁场增大而伸长或缩短的现象称为线磁致伸缩；把磁性材料的体积随磁场增大而改变的现象称为体磁致伸缩。效应的强弱可用相应的磁致伸缩系数表示：

$$\lambda = \Delta l/l = [l(H) - l(0)]/l(0)$$

$$\omega = \Delta v/v = [v(H) - v(0)]/v(0)$$

这里，λ 和 ω 分别称为线磁致伸缩系数和体磁致伸缩系数。$l(H)$ 和 $l(0)$ 分别是磁场等于 H 和零时的材料长度，$v(H)$ 和 $v(0)$ 分别是磁场等于 H 和零时的材料体积。

饱和磁致伸缩系数 saturation magnetostriction constant 对于磁性材料来说，当磁场从零增大时，线磁致伸缩系数 λ 将随着磁场的增大而增大，最后达到最大值，并不再随磁场的继续增大而增大，这时的线磁致伸缩系数称为饱和磁致伸缩系数。一般用符号 λ_s 表示。

在立方结构的磁性单晶中，饱和磁致伸缩系数 λ_s 随晶向的不同而不同。如果沿着[100]和[111]方向的饱和磁致伸缩系数分别用符号 λ_{100} 和 λ_{111} 表示，则相应的磁性多晶体的饱和磁致伸缩系数 λ_s 为

$$\lambda_s = [2\lambda_{100} + 3\lambda_{111}]/5。$$

居里温度 Curie temperature 见“居里点”。

居里点 Curie point 又称居里温度，相应于铁磁性物质从铁磁性转变为顺磁性，或亚铁磁性物质从亚铁磁性转变为顺磁性的温度。

在铁磁性或亚铁磁性物质内部，由于磁性原子或磁性离子之间存在着交换作用或超交换作用使原子或离子磁矩相互之间呈平行排列或反平行排列。另一方面，原子磁矩或离子磁矩同时还要受到热扰动的作用，力图使磁矩呈混乱排列。当磁性物质的温度逐渐升高，热扰动的破坏作用相应增强。在某一温度下，交换作用强度与热扰动作用相当，原有的磁矩有序排列被破坏，造成强磁性消失。这一温度就对应于物质的居里点。

铁磁居里点 ferromagnetic Curie point 见“铁磁性”。

顺磁居里点 paramagnetic Curie point 见“铁磁性”。

抵消温度 compensation temperature 见“抵消点”。

抵消点 compensation point 又称抵消温度。在铁氧体一类亚铁磁性物质中，通常包含两个磁子晶格，每个磁子晶格内的离子磁矩都是平行排列的，而两个磁子晶格的磁矩之间却是反平行排列的。在大多数含稀土离子的石榴石铁氧体材料中，两个磁子晶格的饱和磁化强度 M_A 和 M_B 随温度的变化曲线不同，例如，在温度较低时，$M_A > M_B$；在温度较高时，$M_A < M_B$。因此在某一温度 T_d 时，正好有 $M_A = M_B$。由于 M_A 和 M_B 的方向是相反的，所以这时材料总的饱和磁化强度为零。这一温度称为抵消点。

居里定律 Curie law 见“顺磁性”。

居里-外斯定律 Curie-Weiss law 见“顺磁性”、“铁磁性”、“反铁磁性”、“亚铁磁性”。

退磁 demagnetization 使磁性材料达到磁中性状态的操作过程称为退磁，也称为磁中性化。常用的退磁方法有交流退磁法、直流退磁法和热退磁法。交流退磁是首先对磁性材料施加足够强的交变磁场，其强度一般为材料矫顽力的 5～10 倍，随后逐渐降低磁场到零。直流退磁法是在施加足够强的直流磁场后，在逐步降低磁场强度的同时必须不断改变磁场的正反方向直至磁场降到零。热退磁法是将材

料加热到它的居里温度以上，在无外加磁场存在的情况下逐渐降温到室温。见“磁中性态”。

退磁场 demagnetizing field 对于非闭合形状或非无限长的磁性材料来说，当其在外加磁场中被磁化时，材料内部所测量到的总磁场强度总是小于外加的磁场强度。根据磁荷观点，这时因为材料被磁化后，其两个端面上，将分别出现符号相反的正负磁荷，形成 N、S 两个磁极。它们将在材料内部产生一个方向与材料磁化强度方向相反、起着减弱外磁场和磁化作用的附加磁场，称为退磁场。退磁场的大小不仅和磁极强度有关，而且也和材料的形状有关。

退磁因子 demagnetization factor 如果磁性材料在外加磁场中被均匀磁化，内部由其自身产生的退磁场 H_{d} 将和材料的磁化强度 M 成正比，即可以表示成如下形式：

$$H_{\mathrm{d}} = -NM$$

式中，N 是比例系数，称为退磁因子，其数值和材料的几何形状有关。负号表示在材料内部 H_{d} 和 M 两者方向相反。

退磁因子的计算一般只能限于可被均匀磁化的磁性旋转椭球体。球形磁体是其特例。设椭球体三个主轴的长度分别为 a、b、c，沿这三个主轴方向的退磁因子分别为 N_a、N_b、N_c，可以证明：

$$N_a + N_b + N_c = 1$$

由上式便可直接得出简单形状磁体的退磁因子。例如，对于球体，$N_a = N_b = N_c = 1/3$；对于长轴为 c 的细长圆柱体，$N_a = N_b = 1/2$，$N_c = 0$；对于主轴 c 垂直板面的薄圆板，$N_a = N_b = 0$，$N_c = 1$。磁性旋转椭球体的退磁因子值可直接在磁学书中查到。

分子场理论 molecular field theory 1907 年，外斯提出分子场理论，其包含以下两个假设：

(1)分子场假设　铁磁物质内部在居里温度以下存在一个很强的分子磁场，数值上可达 10^9 A/m。正是在这一分子场的作用下，使铁磁物质得以克服热扰动的不利影响将磁矩整齐排列起来，从而造成自发磁化。

(2)磁畴假设　大块铁磁性物质内部，存在许多小区域，在每一个这样的小区域内，原子磁矩受到分子场的作用都是平行取向的，而不同磁畴中的原子磁矩取向却不同。具有这样特点的小区域称为磁畴。根据这一假设，铁磁性物质在没有受到外磁场作用时的总磁矩应为各磁畴磁矩的矢量和，由于铁磁物质包含着大量的磁畴，而各个磁畴的磁矩取向又不一样，结果总磁矩为零，于是就很好地解释了铁磁性物质在退磁状态下不显示磁性的问题。

外斯根据上述两个基本假设，同时利用朗之万的顺磁性理论，并假定分子场正比于自发磁化强度 M_{s}，成功地解释了铁磁性的部分规律。但是，有关分子场的本质，一直到 1928 年海森伯利用量子力学理论才得到正确阐明，它是由电子磁矩之间的静电性交换作用引起的。

磁化 magnetizing 处于磁中性态的磁性材料在磁场作用下逐步从宏观上无磁性到显示磁性的过程称为磁化。

磁中性态 magnetic neutral state 通过将磁性材料加热到居里温度以上，随后在无外磁场作用下冷却到室温或者对其施加一足够强的交变磁场，随后将交变磁场缓慢地降为零，这样，材料内部的各磁畴的自发磁化方向在空间的分布是均匀的，从而使材料在零磁场下的磁化强度等于零，这种磁性状态称为磁中性状态或磁中性态。

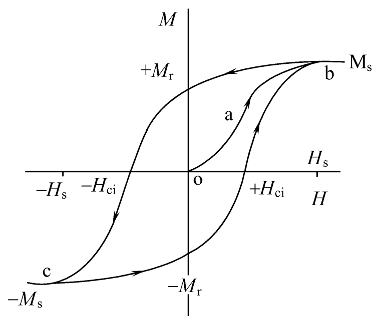
磁化过程 magnetization process 在磁场作用下，磁性材料的磁化强度从磁中性状态为零到非常强的磁场强度下接近饱和磁化强度的过程称为磁化过程。

磁化曲线 magnetization curve 处于磁中性状态下的磁性材料在磁场作用下，磁化强度 M 将随磁场强度 H 的增大而增大，最后在一定的饱和磁场强度 H_{s} 时达到饱和磁化强度值 M_{s}，这时，材料内部的原子磁矩基本上都已经沿磁场取向，再增大磁场强度，磁化强度值不会明显增大。在 M-H 图上绘出磁化强度随磁场强度变化的相应曲线称为磁化曲线，也称初始磁化曲线。相应地，磁性材料的磁感应强度 B 随磁场强度 H 变化的曲线称为 B-H 磁化曲

线。

初始磁化曲线　initial magnetization curve　见“磁化曲线”。

磁滞回线　magnetic hysteresis loop　磁性材料在足够强的磁场(称为饱和磁化场 H_s)作用下被饱和磁化以后,使这一正向磁场强度降为零,材料的磁化强度便会从 M_s 降到 M_r,显然,磁化强度的变化落后于磁场强度的变化,这种现象称为磁滞。M_r 称为剩余磁化强度,简称剩磁。若要使 M_r 变为零,必须对材料施加一反向磁场 H_{ci} 或 ${}_MH_c$,该磁学量称为内禀矫顽力。若将反向磁场逐步增大到 $-H_s$,则材料又将达到饱和磁化。将反向磁场降为零,并继续使磁场强度沿正向增加到 H_s,磁化强度将经过 $-M_r$、H_{ci} 到达 M_s,于是,在 M-H 图上将形成一条封闭曲线,因为磁化强度的变化始终落后于磁场强度的变化,所以这样的封闭曲线称为 M-H 磁滞回线。如图所示。



磁滞回线

相应地,如果磁场强度经历一周期变化,即 $H_s \to 0 \to H_C \to H_s \to H_C \to H_s$,磁感应强度 B 的变化在 $B-H$ 图上也会构成一条封闭回线,称为 $B-H$ 磁滞回线。在这种磁滞回线上,材料经饱和磁化后因撤去磁场所保留的磁感应强度称为剩余磁感应强度,也简称剩磁 B_r。使 B_r 降为零所需要施加的反向磁场称为矫顽力,用 ${}_BH_C$ 或 H_C 表示。另外,当磁场强度为 H_s 时,磁化强度为饱和值 M_s,所对应的磁感应强度称为饱和磁感应强度,用 B_s 表示,这时,$B_s = \mu_0(H_s + M_s)$。μ_0 为真空磁导率。

退磁曲线　demagnetization curves　饱和磁滞回线的第二象限部分称为退磁曲线,是反映硬磁材料磁性能好坏的特征曲线。

磁化率　magnetic susceptibility　任何材料在磁场的作用下将被磁化,并显示一定特征的磁性。这种磁性不仅仅由磁化强度或磁感应强度的大小来表征,而且应由磁化强度随外磁场的变化特征来反映。为此,定义材料在磁场作用下,磁化强度 M 与磁场强度 H 的比值为磁化率:

$$\chi = M/H$$

通常,磁化强度指的是材料单位体积中原子或离子磁矩的矢量和,所以上式定义的磁化率也称为体积磁化率。如果已知材料的密度为 ρ,则材料单位质量的磁化率为

$$\chi_m = \chi/\rho$$

此外,还可定义摩尔磁化率为1摩尔物质的磁化率

$$\chi_M = \chi_m M$$

式中,M 是分子量。

根据磁化率的大小和正负及其随温度变化的行为常可判断材料磁性的种类。

磁导率　magnetic permeability　材料在磁场 H 的作用下被磁化,具有一定的磁感应强度 B。两者的比值称为绝对磁导率 μ',即

$$\mu' = B/H$$

绝对磁导率与真空磁导率 μ_0 之比称为相对磁导率 μ:

$$\mu = \mu'/\mu_0$$

数值上,$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m。相对磁导率通常也简称为磁导率。

在国际单位制中,相对磁导率和磁化率的关系为

$$\mu = 1 + \chi$$

初始磁化率　initial susceptibility　初始磁化率是磁化率在 H 趋于零时的极限值

$$\chi_i = \lim_{\substack{H\to 0\\ \Delta H\to 0}} (\Delta M/\Delta H) = (\mathrm{d}M/\mathrm{d}H)_{H\to 0}$$

如以磁化强度为纵坐标,磁场强度为横坐标作图,初始磁化率就等于该图上磁化曲线在原点处的切线的斜率。在实际测量时,常常是在很弱的磁场(一般,$H<1$A/m)下测得的磁化强度

与磁场强度的比值，或者是在弱磁场下测出的 M/H 比值对磁场强度作图并外插到 $H=0$ 时得到的数值为初始磁化率。

最大磁化率 maximum susceptibility 在 M-H 磁化曲线上，从原点 O 向曲线膝部引一条直线 OP，使其与磁化曲线在 P 点相切，这时，P 点所对应的磁化强度与磁场强度的比值就是最大磁化率

$$\chi_{max} = (M/H)_{最大}$$

如图所示，其值等于图中直线 OP 的斜率：

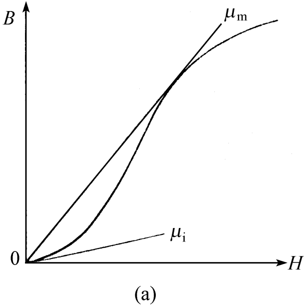
$$\chi_{max} = \tan\alpha$$

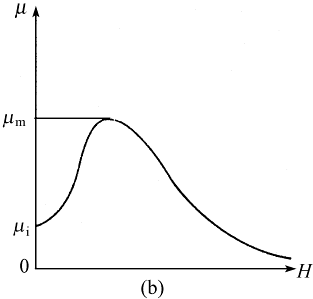
这里，α 是直线 OP 与 H 轴之间的夹角。

初始磁导率 initial permeability B-H 磁化曲线上，在原点附近曲线的斜率与真空磁导率 μ_0 之比为初始磁导率。(见图)也可仿照初始磁化率定义初始磁导率，即

$$\mu_i = \lim_{\substack{H\to 0\\ \Delta H\to 0}} (\Delta B/\mu_0 \Delta H) = (\mathrm{d}B/\mu_0 \mathrm{d}H)_{H\to 0}$$

最大磁导率 maximum permeability 在磁性





初始磁导率和最大磁导率

材料的初始磁化曲线上，从原点向该磁化曲线膝部某点引一切线，使其具有最大斜率。该斜率值除以真空磁导率 μ_0 就是材料的最大磁导率，用 μ_{max} 或 μ_m 表示。如图所示。

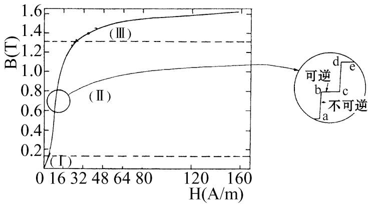
增量磁导率 incremental permeability 对磁性材料施加一偏置磁场，使材料固定于该材料磁滞回线的某一点上，然后对材料施加一幅度为 H_Δ 的交变磁场，所得到的相应的磁感应强度的变化值为 B_Δ，则增量磁导率可定义为

$$\mu_\Delta = B_\Delta/\mu_0 H_\Delta$$

微分磁导率 differential permeability 磁性材料 B-H 磁化曲线上每一点处的切线斜率除以真空磁导率 μ_0 为微分磁导率，即

$$\mu_d = \mathrm{d}B/\mu_0 \mathrm{d}H$$

技术磁化 technical magnetization 在磁场作用下，磁性材料通过内部磁畴结构的调整(包括畴壁位移和磁畴转动)使磁化强度随磁场强度的增大而增大，最后逐渐趋近饱和磁化的过程称为技术磁化。磁性材料的技术磁化过程一般包括畴壁的可逆位移(初始磁化阶段)、不可逆位移(陡峻磁化阶段)、磁畴磁矩的可逆转动以及趋近饱和等四个阶段。如图所示。在陡峻磁化阶段，畴壁位移表现为巴克豪森跳跃。



磁化曲线，插图表示巴克豪森效应

(Ⅰ)可逆畴壁位移(初始磁化阶段)；(Ⅱ)不可逆畴壁位移(陡峻磁化阶段)；(Ⅲ)可逆磁畴转动阶段及趋近饱和阶段

内禀磁化 intrinsic magnetization 磁性材料在非常强的磁场作用下，克服热运动对磁矩整齐排列所起的破坏作用，从而使材料的磁化强度随磁场强度的增大而增大的过程称为内禀磁化。

自发磁化 spontaneous magnetization 这是

存在于铁磁性物质、亚铁磁性物质和反铁磁性物质内部的一种普遍现象。由于磁性原子或磁性离子之间有很强的交换作用或超交换作用,导致在磁畴范围内的原子磁矩或离子磁矩相互之间呈平行排列(铁磁性)或反平行排列(亚铁磁性和反铁磁性)的现象称为自发磁化。

磁性材料在未受到外加磁场作用时,内部磁畴中单位体积磁矩的矢量和称为自发磁化强度。它等于在 M-H 曲线上,将饱和磁化阶段的饱和磁化强度外插到磁场强度为零时的磁化强度值。

磁场 magnetic field 磁场和物理学中的一切场一样,是物质存在的一种形式。它存在于永磁体或载流导体的周围空间。磁场是矢量,它的方向和大小可用磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 来描述。磁体和磁体、磁体和电流之间的相互作用都是通过磁场来传递的。磁场具有能量,单位体积的磁场能量为

$$W = \boldsymbol{BH}/2$$

式中,$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别是表征这一磁场的磁感应强度和磁场强度。

磁场的分布也可用磁感应线来表示。磁感应线是一些假想的曲线,这些曲线上的每一点的切线方向就是磁感应强度矢量 $\boldsymbol{B}$ 的方向,垂直于磁感应强度的截面上每单位面积穿过的磁感应线的数目正好等于该处的磁感应强度的大小。符合这种规定的线也叫磁通线。为此,磁感应强度也称为磁通密度。对于永磁体或载流螺线管,外部空间的磁感应线总是从 N 极出发通向 S 极,在内部空间则是从 S 极通向 N 极。因此,每一条磁感应线在空间都是闭合的。

磁极 magnetic pole 一棒状永磁体经充磁后会保留很强的磁性,从而在其周围空间将产生磁场。磁体的两端是呈现磁性最强的部分,叫做磁极。自由悬挂在空间的永磁体在地球磁场的作用下,将大致指向地理南北的方向上。指向地理北极的磁极称为指北极,简称北极,又称 N 极;指向地理南极的磁极称为指南极,简称南极,又称 S 极。N 极和 S 极总是成对出现的。将一充过磁的棒状永磁体折为两截,每一截都是一个永磁体,它们的两磁极指向和折断前的大永磁体的相同。当两个磁极相互靠近时,通过磁场的传递,它们之间将产生一相互作用力 F,服从静磁学的库仑定律:

$$F = kmm'\boldsymbol{r}/\boldsymbol{r}^3$$

式中,m 和 m' 分别是两个相互靠近的磁极的磁极强度,$\boldsymbol{r}$ 是这两个磁极之间的距离矢量。k 是比例系数。在国际单位制中,如考虑磁极位于真空中,$k = 1/(4\pi\mu_0)$。μ_0 是真空磁导率。根据磁学中的磁荷观点,磁极处聚集有磁荷,N 极带有正磁荷,S 极带有负磁荷。这是电磁学发展初期提出的概念,优点是可以将磁学中的有关计算直接利用电学中电荷产生电场的公式来类比考虑。一磁极强度为 m 的磁极在空间所产生的磁场计算可以这样来考虑:将一磁极强度为 m' 的指北极置于磁极 m 产生的磁场中,定义作用于单位指北极上的力为磁场强度 $\boldsymbol{H}$:

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{F}/m' = m\boldsymbol{r}/(4\pi\mu_0\boldsymbol{r}^2)。$$

磁场强度是矢量,其方向总是从 N 极指向 S 极。

如同磁感应强度可以用磁感应线来描述那样,磁场强度也可以用磁力线来描述,只要规定磁力线上的每一点的切线方向代表该点的磁场强度的方向,磁场强度的大小用垂直于磁场强度的每单位面积的磁力线数目来表示。和磁感应线不同的是磁力线在磁体内部和外部都是从 N 极指向 S 极。对于载流螺线管,电流在螺线管的两端也有磁极,这时的磁力线是闭合曲线,在螺线管的外部空间,磁力线从 N 极指向 S 极,而在内部空间则是从 S 极指向 N 极。

磁感应强度 magnetic induction 这是表征磁场方向和大小的物理量。在电磁学中,其定义有三种方式:

(1)由试探电流元在磁场中受到的力 F 来表征,设无限小的电流元为 $I\mathrm{d}l$,则电流元在磁场中所受到的力等于

$$F = I\mathrm{d}l \times B$$

B 的方向沿电流元不受力的方向,按右手定则来确定。磁感应强度 B 的大小为

$$B = F_{最大}/(I\mathrm{d}l)$$

$F_{最大}$代表在电流元 $I\mathrm{d}l$ 和 B 的夹角为 $\pi/2$ 时

电流元所受到的力。

(2)由试探线圈在磁场中所受到的力矩 $\boldsymbol{L}$ 来表征。设试探线圈的磁矩为 $\boldsymbol{M}$,它等于通过该线圈的电流和线圈包围面积的乘积。它在磁场中所受到的力矩等于

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{B}$$

B 的方向是改线圈所受力矩为零时线圈正法线所指的方向,由该式按右手定则确定。B 的大小为

$$B = L_{最大}/m$$

式中,$L_{最大}$是当线圈的法线和磁场方向垂直时线圈所受到的力矩。

(3)由试探运动正电荷在磁场中受到的力 $\boldsymbol{F}$ 来表征。该力的表示式为

$$\boldsymbol{F} = q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}$$

式中,q 和 $\boldsymbol{v}$ 分别是试探正电荷所带的电量和在磁场中运动的速度。$\boldsymbol{B}$ 的方向沿运动电荷不受力的方向,由该式按右手定则确定。$\boldsymbol{B}$ 的大小则等于

$$B = F_{最大}/(qv)$$

式中,$F_{最大}$为运动正电荷的速度 $\boldsymbol{v}$ 垂直于 $\boldsymbol{B}$ 时所受到的力。

一电流元 $Id\boldsymbol{l}$ 在空间某点所产生的磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 由下式所示:

$$d\boldsymbol{B} = \frac{\mu_0 I d\boldsymbol{l} \times \boldsymbol{r}_{12}}{4\pi r_{12}^3}$$

式中,r_{12}是从电流元到磁场中改点的距离。μ_0 是真空磁导率。B 的方向按右手定则确定,即和线元 $d\boldsymbol{l}$ 的切线和电流元到该电的连线所确定的平面相垂直。上式就是电磁学中著名的毕奥-沙伐尔定律。

饱和磁感应强度 saturation induction 见"磁滞回线"。

如果一磁性材料在饱和磁化场 H_s 的作用下,磁化强度达到饱和值 M_s,则材料的饱和磁感应强度 B_s 为

$$B_s = \mu_0(H_s + M_s)$$

需要特别指出的是,在 B-H 磁滞回线上,由于磁场强度在达到 H_s 后,如继续增大磁场强度,饱和磁化强度 Ms 保持不变,而根据公式 $B = \mu_0(H + M)$,磁感应强度实际上是随着磁场强度的增大而增大,并不存在饱和值。在软磁材料的情况下,因为饱和磁场一般都很小,而饱和磁化强度值又很大,因此,尽管在饱和磁化后磁场强度继续增大,但对磁感应强度的影响并不会太大,因此可按上式定义软磁材料的饱和磁感应强度。

剩余磁感应强度 residual induction 见"磁滞回线"。

磁化强度 magnetization 单位体积磁性物质中原子磁矩或离子磁矩的矢量和称为磁化强度。

饱和磁化强度 saturation magnetization 见"磁化曲线"。

比饱和磁化强度 specific saturation magnetization 单位质量磁性物质中原子或离子磁矩的矢量和称为比饱和磁化强度,常用符号 σ_s 表示。它和饱和磁化强度 M_s 的关系为

$$\sigma_s = M_s/d$$

式中,d 是材料的密度。

剩余磁化强度 residual magnetization 见"磁滞回线"。

磁场强度 magnetic field strength 见"磁极"。

矫顽力 coercivity 见"磁滞回线"。

内禀矫顽力 intrinsic coercivity 见"磁滞回线"。

趋近饱和律 law of approach to saturation 多晶磁性材料在强磁场作用下,将趋近饱和磁化,各晶粒中的磁化强度矢量与磁场方向已经非常靠近。此时所有的磁性物质几乎都有类似的磁化曲线形状,从而服从趋近饱和磁化的普遍规律,即趋近饱和律,其表达式是

$$M = M_s(1 - a/H - b/H^2 - c/H^3 - \cdots) + \chi_p H$$

式中,第一项对应于技术磁化过程,系数 a、b、c 是反映材料磁化过程中畴壁位移和磁畴转动所受到的阻滞大小的常数;第二项对应于顺磁过程,χ_p 是顺磁磁化率。如果认为在趋近饱和磁化阶段,畴壁位移已经大致完成,磁化可以通过磁畴转动过程继续进行,则系数 b 主要是来源于材料中磁晶各向异性对这一磁畴转动

过程的阻滞。于是,对立方晶体理论上可推得

$$b = 8K_1^2/(105\mu_0^2 M_s^2)$$

式中,K_1 是磁晶各向异性常数,M_s 是饱和磁化强度。实验上,可根据趋近饱和律,测定磁性材料的饱和磁化强度和磁晶各向异性常数。

磁畴　magnetic domain　铁磁性物质内部存在着一些小区域,在没有受到任何外加磁场作用的前提下,由于磁性原子之间的交换相互作用,使得它们的磁矩互相平行排列。这样的小区域称为磁畴。利用毕特粉纹法和磁光效应法可观察磁畴。

磁泡　magnetic bubble　磁泡是一种存在于单晶薄膜磁性材料中的圆柱状磁畴,直径为 1～100μm。由于在用显微镜观察磁畴结构时,从薄膜表面上看到的这些圆柱状磁畴就像露在水面上的气泡,因而得名。磁泡材料主要有含稀土元素的石榴石铁氧体和正铁氧体的单晶薄膜,生长在钆镓石榴石单晶基片上。磁泡材料具有很强的垂直各向异性和较低的饱和磁化强度。在未受到磁场作用时,膜内有许多条状畴,它们的磁矩取向要么垂直膜面向上,要么垂直膜面向下。当沿着垂直于膜面方向施加磁场时,内部磁矩取向和外加磁场方向相反的条状畴将缩小,随着磁场强度的增大,为降低畴壁能,它们将逐渐收缩成一个个互相隔开的圆柱状磁畴。当磁场很强时,磁泡便消失。利用磁泡的产生、运动和消失可以制成磁泡存储器。

单畴颗粒　single domain particle　大块磁性材料为了降低本身的退磁能,必定包含许多磁畴。当其体积逐渐减小成为颗粒时,假定这些颗粒呈球形,半径为 r,则由于总退磁能和颗粒体积 $4\pi r^3/3$ 成正比,而总畴壁能和颗粒表面积 $4\pi r^2$ 成正比,可以想见,当颗粒半径 r 减到很小时,总退磁能迅速下降,以至于有可能小于总畴壁能,这样取消畴壁就可以到达总能量最低的稳定状态。因此,在足够小的颗粒中,有可能出现单畴状态,即整个颗粒内的磁矩都沿同一方向取向。这种颗粒称为单畴颗粒。磁性颗粒要成为单畴颗粒,其半径必须小于某一个临界半径 R_c。当颗粒半径大于 R_c 时,颗粒将是多畴的。该半径 R_c 就称为材料的单畴临界尺寸。

单畴临界尺寸　critical size of the single domain　见“单畴颗粒”。

磁畴转动　domain rotation　在外磁场作用下,磁性材料中各个磁畴内部的所有磁矩整体一致地但对不同磁畴是程度不同地向磁场方向转动,从而使沿磁场方向测得的磁化强度随磁场强度的增大而逐渐增大。这一过程称为磁畴转动。磁畴转动的阻力主要来自磁各向异性。和畴壁位移一样,磁畴转动的容易与否也是影响磁导率、矫顽力等磁性参数的重要因素。

畴壁　domain wall　大块磁性物质中,往往包含着许多磁畴。相邻两个磁畴之间,磁矩从一个磁畴内的取向向另一个相邻磁畴内取向转变的过渡层称为畴壁。如果按畴壁两侧磁畴中磁矩方向的夹角分类,畴壁有 180°壁和 90°壁两种。180°壁是指其两侧磁畴中的磁矩方向的夹角为 180°的畴壁;90°壁则是指其两侧磁畴中的磁矩方向为 90°、107°或 71°的畴壁。如果按畴壁中磁矩转向的方式分类,则有布洛赫畴壁和奈耳畴壁两种。请参见相关词条。

畴壁位移　domain wall displacement　在外磁场作用下,内部磁矩取向和磁场方向比较接近的磁畴的体积将增大,而磁矩取向和磁场方向夹角较大的磁畴体积将缩小。这一磁化过程相当于畴壁从未加磁场前的位置移到了一个新的位置,从而使材料的磁化强度有一净的增大量。这一过程称为畴壁位移。它是技术磁化过程的重要机理之一。畴壁位移的阻力主要来自材料内部的内应力、掺杂、气孔、缺陷等对畴壁的钉扎。畴壁位移的容易与否将是影响磁导率、矫顽力等磁性参数的重要因素。

布洛赫畴壁　Bloch wall　如果令畴壁的法线方向为 $\boldsymbol{n}$,当磁矩在畴壁中逐步转变它们的取向过程中,始终满足 $\boldsymbol{M_s}\cdot\boldsymbol{n}=$常数的条件,这样的畴壁称为布洛赫畴壁。如 $\boldsymbol{M_s}\cdot\boldsymbol{n}=0$,即磁矩在畴壁中转向时,磁化矢量 $\boldsymbol{M_s}$ 始终垂直于法线方向转向,这样的畴壁就是 180°壁。

奈耳畴壁　Neel wall　通常在薄膜一类磁性材料中,畴壁内磁矩转变取向时将始终保持与薄膜表面平行,这样的畴壁称为奈耳畴壁。

毕特粉纹图 Bitter powder pattern 1931年,毕特提出了一种将微细磁粉的胶状悬浮液滴在经过仔细抛光处理的磁性材料表面,通过采用光学显微镜便可观察磁畴结构的方法。后被命名为毕特粉纹法,一直沿用至今。用这种方法观察到的磁畴图形称为毕特粉纹图。在这些图形中,微细磁粉大多集中在暴露于样品表面的布洛赫畴壁处,因为这些部位有自由磁极出现,导致胶状悬浮液中的磁粉会受自由磁极吸引而聚集。

最大磁能积 maximum magnetic energy product 这是硬磁材料 $B-H$ 退磁曲线上各点所对应的磁感应强度 B 和磁场强度 H 乘积中的最大值。用符号 $(BH)_{max}$ 表示,单位为千焦/米^3(国际单位制)或兆高奥(高斯单位制)。对于永磁体来说,材料的最大磁能积值越大,在一定空气隙中产生同样大小的磁场强度所需要的材料体积就越少。

自旋波 spin wave 自旋波理论是1930年由布洛赫首先提出的。设想有一铁磁自旋系统,单位体积内有 N 个原子呈规则排列,每个原子自旋 $S=1/2$。在温度为0K时,铁磁系统处于基态,由于原子之间存在交换作用,所有自旋平行排列,指向为正向。总的磁化强度 $M_0=N\mu_B$(μ_B 为玻尔磁子)。当温度稍有上升,由于热扰动的影响,使得系统中有一自旋翻转,指向反向,则因为相邻自旋之间的交换作用,这一反向自旋将使最邻近的自旋也有翻转的趋势。待邻近自旋反向后,这一原先反向的自旋又回到正向取向,由此类推,意味着一个反向自旋实际上不可能停留在系统的格点上不动,而是形成了反向自旋在晶体中的传播,称为自旋波。随着温度继续升高,有更多的自旋被反向,饱和磁化强度的下降可看成是更多的反向自旋波被激发。显然,自旋反向是等概率地分布在系统包含的所有格点上,而每个格点自旋的翻转概率仅为单个反向自旋的 $1/N$,因此,激发自旋波的能量远低于单个反向自旋的能量。在低温下,热运动能量很小,单个自旋翻转的概率也小,但是照样可以激发自旋波。自旋波理论指出,对于长波近似,自旋波的色散关系为 $\omega_k=Dk^2$(D 是自旋波的劲度系数,ω_k 是波矢为 k 的自旋波的圆频率),同时,低温下的各个自旋波可以看成是独立的,总能量等于所有自旋波的能量之和。理论预言低温下铁磁体的自发磁化强度与温度 T 的关系服从 $T^{3/2}$律,即 $M_s=M_0(1-CT^{3/2})$,这里的 C 为常数,这一温度依赖性已为磁性过渡金属低温磁性的实验研究所证实。

根据量子力学,波的最小能量量子为 $\hbar\omega$($\hbar=\frac{h}{2\pi}$,h 为普朗克常数)。对于自旋波而言,一个自旋翻转后,系统的能量由于反向自旋和最近邻自旋间的交换作用能的增大而增大。因此,每多翻转一个自旋,最小的能量增量就等于 $\hbar\omega$。另外,波矢为 k 的自旋波还具有准动量 hk。这就是说,自旋波的能量和动量都是不连续变化的,表现出一种量子的特性。所以,自旋波的行为除了具有波动性外,还具有粒子性。正因为这样,自旋波又叫做磁振子或磁激子。

四、动态磁性与磁损耗 *Dynamic Magnetic Properties and Losses*

趋肤效应 skin effect 当交流电流经导体时,随着频率的升高,在导体截面上的电流分布具有向导体表面集中的趋势,这种现象称为趋肤效应。当一磁性材料受到交变磁场作用时,由于趋肤效应,材料内部的磁场或磁感应强度将比相应的表面值低。通常,把材料内部磁感应强度下降到表面值的 $1/e$(即37%)处离开表面的距离叫做趋肤深度,用 δ 表示。δ 的大小和材料的磁导率与电阻率有关:

$$\delta=5030\sqrt{\rho/\mu f}$$

式中,μ 和 ρ 分别是材料的相对磁导率与电阻率(欧姆-厘米),f 是交流电的频率(赫兹)。δ 的单位是厘米。

动态磁化曲线 dynamic magnetization curves 保持交变磁场的频率不变,使交变磁场的峰值从小变到饱和磁场值,便可以相应地得到一族从小到大的磁滞回线,在 $B-H$ 图的第一象

限内通过连接各个磁滞回线的顶点所得到的曲线称为动态磁化曲线。

动态磁滞回线 dynamic hysteresis loops 磁性材料在交变磁场作用下经受了周期性地反复磁化所形成的 $B-H$ 或 $M-H$ 的封闭回线称为动态磁滞回线。动态磁滞回线所包围的面积反映了材料交变磁化一周磁损耗的大小。当交变磁场峰值减小或交变磁场频率升高时，动态磁滞回线的形状将倾向于变成椭圆状。

复数磁化率 complex susceptibility 磁性材料在高频弱交变磁场作用下，其磁化强度将随磁场强度的周期变化而落后于磁场强度一相位角 δ 发生周期变化。于是，材料的磁化率应用一复数来表示，称为复数磁化率；即

$$\tilde{\chi} = \chi' - j\chi''$$

χ' 和 χ'' 分别是复数磁化率的实部与虚部，两者分别标志磁性材料在交变磁场作用下所储存和所消耗的能量大小。它们与复数磁导率 $\tilde{\mu} = \mu' - j\mu''$ 的实部和虚部的关系如下

$$\mu' = 1 + \chi'$$

$$\mu'' = \chi''$$

复数磁导率 complex permeability 磁性材料在正弦周期变化的交变磁场 H 的作用下，其磁化状态也将发生周期性的变化，但是，由于时间效应，磁感应强度 B（或磁化强度 M）不可能随 H 同步变化。如果磁场是正弦周期变化的高频弱场：$H = H_m \sin \omega t$，则磁感应强度将落后于 H 一个相位角 δ 变化，即

$$\begin{aligned} B &= B_m \sin(\omega t - \delta) \\ &= B_m \cos\delta \sin\omega t \\ &\quad + B_m \sin\omega t \sin(\omega t - \pi/2) \end{aligned}$$

该式右侧第一项和 H 同相位，第二项比 H 落后了 $\pi/2$。根据磁导率的定义 $\mu = B/\mu_0 H$，材料的磁导率可用一复数表示，即

$$\tilde{\mu} = \mu' - j\mu''$$

式中，$\tilde{\mu}$ 称为复数磁导率。它的实部

$$\mu' = B_m \cos\delta / \mu_0 H_m = \mu_m \cos\delta$$

表征着磁性材料所储藏的能量大小。而它的虚部

$$\mu'' = B_m \sin\delta / \mu_0 H_m = \mu_m \sin\delta$$

则决定着磁性材料所消耗的能量。这里，$\mu_m = B_m / \mu_0 H_m$，称为振幅磁导率。

品质因数（Q）值 quality factor 这是表征软磁材料性能的特征量。定义为材料在交变磁场作用下所储存能量和所消耗能量之比的 2π 倍，数值上等于复数磁导率的实部与虚部之比，即

$$Q = \mu' / \mu''$$

一般，常用 μ' 和 Q 的乘积来反映软磁性能的好坏，$\mu' Q$ 乘积越大，软磁性能就越好。用软磁材料做成器件后，往往会开有气隙。这时，μ' 下降，Q 值升高，但 $\mu' Q$ 乘积值不变。

损耗角正切（tan δ） loss angle tangent 这是表示软磁材料磁损耗性能的特征量。数值上，等于品质因数（Q 值）的倒数，也即等于复数磁导率的虚部与实部之比：

$$\tan\delta = 1/Q = \mu''/\mu'$$

磁谱 magnetic spectrum 软磁材料在交变磁场作用下，其磁导率可用一复数磁导率 $\tilde{\mu} = \mu' - j\mu''$ 来表示。复数磁导率的实部 μ' 和虚部 μ'' 随交变磁场的频率变化的曲线称为磁谱。

一般，对于铁氧体材料来说，典型的磁谱可以分为下列五个区域：

（1）低频区（$<10^4$Hz）：主要特点是 μ' 大、μ'' 小，两者几乎不随频率的变化而变化。μ'' 的变化主要是由磁滞和磁后效造成的剩余损耗引起的。

（2）中频区（$10^4 \sim 10^6$Hz）与低频区磁谱类似，μ'、μ'' 变化不大，但 μ'' 有时会出现峰值，这是由尺寸共振、磁力共振引起的。

（3）高频区（$10^6 \sim 10^8$Hz）特点是 μ'' 急剧升高，而 μ' 急剧下降。μ'' 出现峰值是由于畴壁共振引起的。

（4）超高频区（$10^8 \sim 10^{10}$Hz）这一频率范围内，μ' 进一步下降，$\mu' - 1$ 可能出现负值。μ'' 会出现新的峰值，这是由自然共振引起的。

（5）极高频区（$>10^{10}$Hz）至今研究较少。据估计，在这一频率范围内，会出现自然交换共振。

截止频率 cut-off frequency 软磁材料在交变磁场作用下，复数磁导率的实部 μ' 将随频率的升高而下降。当到达某一频率时，该实部 μ' 降到初始磁导率 μ_i 的一半，同时复数磁导率的

虚部 μ''达到最大值,该频率称为这种软磁材料的截止频率。截止频率是一种软磁材料理论上可以使用的最高频率,但是,实际的使用频率要低得多,仅为截止频率的 1/4～1/6。

铜耗 copper losses 一般磁性材料制成铁芯使用的时候,总要绕上线圈通以电流使其磁化,由于线圈多为铜线做成,电流流经铜线时因铜线电阻导致发热而损失掉的那部分能量,称为铜耗。

磁损耗 magnetic losses 在交变磁场作用下,磁性材料内部产生的各种能量损耗的总和称为磁损耗。通常,磁损耗由磁滞损耗、涡流损耗和剩余损耗三部分组成。

磁滞损耗 hysteresis losses 在直流磁场和交变磁场作用下,磁性材料由于存在不可逆磁化过程造成磁感应强度落后于磁场强度的变化,从而将损失一部分能量,称为磁滞损耗。通常,在磁场较强和频率较高时,磁滞损耗往往和涡流损耗互有影响,不易分离。在低频弱场情况下,动态磁滞回线服从瑞利定律,如果磁场强度随时间为正弦变化,磁感应强度只考虑基波成分,则磁化一周的磁滞损耗等于磁滞回线所包围的面积,即

$$W_h = 4\mu_0 b H_m^3/3$$

式中,μ_0 是真空磁导率,b 是瑞利常数,H_m 是交变磁场强度的振幅值。这一损耗值和同样磁场强度下直流磁化时磁滞损耗的数值相同。在低频强场下,磁滞损耗在总损耗中的比例较大。对于频率低于 100Hz、磁导率低于 5000 的磁性材料(例如硅钢片),磁化一周的磁滞损耗可用下面的经验公式表示:

$$W_h = \eta B_m^{1.6}$$

式中,η 是比例系数,B_m 是交变磁感应强度的振幅值。

涡流损耗 eddy losses 根据法拉第电磁感应定律,在交变磁场作用下,磁性材料将感应出电动势。如果材料的电阻较小,感应电动势就会在材料内部产生感应电流,由于这种电流的流线在垂直于磁场方向的截面上,呈平行的闭合旋涡形状,因此叫做涡流。涡流在材料内部流动,会导致材料发热而消耗能量,称为涡流损耗。实际上,这种涡流损耗在普通金属或合金中也会发生,因此也称为经典涡流损耗或宏观涡流损耗。涡流损耗与使用频率和材料的电阻率成反比,和棒状材料的半径或平板状材料的厚度成正比。例如,平板状材料的厚度为 t,该值小于材料的趋肤深度,假定材料的磁导率不随时间和空间而改变,则可以算得单位体积材料磁化一周的涡流损耗为

$$W_e = 1.64\, t^2 f B_m{}^2/\rho \times 10^{-10} (\text{瓦} / \text{米}^3 \cdot \text{周})$$

式中,f 是交变磁场的频率,B_m 交变磁感应强度的振幅,ρ 是电阻率。

剩余损耗 residual losses 磁性材料在交变磁场作用下,总的磁损耗减去磁滞损耗和涡流损耗后所剩余的部分称为剩余损耗。一般,在低频、弱场条件下,剩余损耗主要来自磁后效损耗;在高频条件下,剩余损耗将以一些共振损耗的形式出现,如尺寸共振损耗、畴壁共振损耗以及自然共振损耗等。

微涡流损耗 micro-eddy-current loss 在金属磁性材料中,总的磁损耗减去磁滞损耗和涡流损耗后所剩余的部分通常称为反常损耗。从本质上说,这一损耗也是涡流损耗。因为,材料中有磁畴结构存在,在交变磁场作用下,内部的畴壁将随磁场的变化而来回移动,被移动畴壁扫过的区域磁化矢量 M 将连续地翻转取向。显然,这种局部磁矩取向的改变将导致微观范围内磁通的改变,从而在材料内因产生微涡流而附加的一部分能量损耗,称为微涡流损耗。这就是金属磁性材料中反常损耗有可能比经典涡流损耗要大好几倍的原因。在金属磁性材料中,常把经典涡流损耗和微涡流损耗加在一起,称为表观涡流损耗。

宏观涡流损耗 macro-eddy-current losses 见"涡流损耗"。

转动磁滞损耗 rotation hysteresis loss 作为转子和定子工作在电机中的磁性材料,由于磁化条件比较复杂,产生磁损耗的原因也将比变压器铁芯的情况要复杂一些。旋转电机的铁芯材料不仅受到交变磁场的影响,而且由于旋转,磁场的空间方向也在不断改变。因此,单独研究磁性材料样品在恒定磁场中旋转 360°的行为是有必要的。现在,假定一圆片状磁性样品固定不动,而作用于样品的磁场在转

动。磁场将对原子(或离子)磁矩施加一个力矩,使磁矩取向靠近磁场方向。如果磁场对磁矩的力矩为 L,则当磁场旋转一周,材料中的畴壁将相应地来回移动。如果磁场的转动是无限缓慢的,则通过内部的不可逆磁化过程(如巴克豪森跳跃)使局部磁矩转向产生微涡流而损耗的一部分能量,称为转动磁滞损耗。其数值可以利用转矩仪对该圆片状样品测得,即

$$W_r = -\int_0^{2\pi} L(\theta)\mathrm{d}\theta$$

转动磁滞损耗和磁滞损耗是有区别的。随着磁场强度的增大,使样品趋于饱和磁化时,磁滞损耗逐渐增大,而转动磁滞损耗会出现一最大值,在饱和磁化时又将降为零。这是因为两者的磁化状态是不同的。对于转动磁滞来说,在饱和磁场作用下,材料始终处于饱和磁化状态;而对一般交变磁场作用的情况,材料内部的磁化状态随着磁场的周期变化则是在正向饱和状态和反向饱和状态之间不断变化的。

磁后效 magnetic after-effect 铁磁性或亚铁磁性的单相固溶体或纯金属在磁化过程中,一旦磁场发生突变,材料的磁化强度或磁感应强度的变化落后于磁场变化的现象称为磁后效,属于一种时间效应(弛豫过程)。一般,讨论磁后效时,并不包括那些由材料的金属学相变所导致的和时间有关的磁性改变。

磁后效有两类:一类是扩散后效或可逆后效,称为里希特后效;另一类是热涨落后效或不可逆后效,称为约旦后效。

当磁性材料在磁化时,材料内部的电子或离子(包括空穴)向稳定位置扩散,而且这种扩散在时间上滞后于磁场的改变,从而引起磁化强度或磁感应强度逐渐地趋于一稳定值。这就是扩散磁后效——里希特后效。这种磁后效发生时,材料的损耗正切值强烈地依赖于频率和温度。例如,在纯铁中出现的磁后效就是由内部的碳原子的扩散引起的。

如果磁性材料在磁化时,它的磁化强度或磁感应强度先是随着磁场的改变达到一中间值,随后由于热涨落,再使磁化强度或磁感应强度逐渐地趋于最后的稳定值,这种后效就是热涨落后效——约旦后效。其特点是后效和频率、温度无关。

里希特后效 Richter after-effect 见“磁后效”。

约旦后效 Jordan after-effect 见“磁后效”。

减落 disaccomodation 磁性材料经磁中性化处理(如采用交流退磁法)后,保持其温度和环境条件不变,其初始磁导率随时间而下降的现象叫做减落。这是磁后效的一种表现形式。磁性材料的减落对温度和机械振动十分敏感。

减落系数 disaccomodation coefficient 在一定温度下,将磁性材料进行磁中性化处理,以处理结束时的时间 $t=0$,然后分别在 t_1 和 t_2 时刻测出其初始磁导率值为 μ_1 和 μ_2,则减落系数 DF 可定义如下

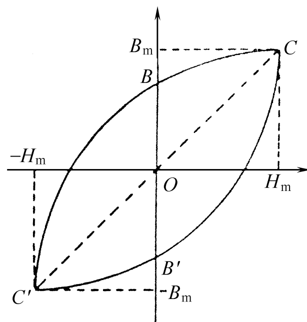
$$DF = (\mu_1 - \mu_2)/[\mu_1^2 \lg(t_2/t_1)]$$

在实际工作中,为计算方便起见,常选择 $t_1=10$ 分钟,$t_2=100$ 分钟,则上式可简化

$$DF = (\mu_1 - \mu_2)/\mu_1^2$$

对于软磁性材料,一般要求 $DF<30\times10^{-6}$。

瑞利区 Rayleigh region 瑞利区指的是磁性材料在受到最大磁场强度为 100A/m 以下的低磁场下的磁化行为,因首先由科学家瑞利(Lord Rayleigh)在 1887 年进行研究而得名。在这一磁化区域内,磁性材料的磁化完全是由畴壁移动引起的。下图中示出了瑞利区内材料的磁化曲线和磁滞回线的示意图。瑞利发现,对于铁丝,在磁场强度低于 3A/m(4×10^{-2} Oe)时,磁导率 μ 是常数,即磁感应强度 B(或



瑞利磁滞回线

磁化强度 M)随磁场强度 H 线性而可逆变化。当磁场强度进一步增大时,便会出现磁滞,μ 不再是常数,而是随 H 线性增大:

$$\mu = \mu_i + bH$$

该式就是瑞利定律。式中,μ_i 是初始磁导率,等于磁化曲线上在坐标原点 O 处的切线的斜率。b 称为瑞利常数。由于 $B = \mu H = (\mu_i + bH)H$,磁滞回线由上下两支抛物线组成,即

$$B = (\mu_i + bH_m)H \pm (b/2)(H_m^2 - H^2)$$

这里,H_m 是最大磁场强度,正号和负号分别代表回线的下降枝和上升枝。

瑞利定律 Rayleigh law 参见词条“瑞利区”。

瑞利常数 Rayleigh constants 参见词条“瑞利区”。

磁共振 magnetic resonance 一磁矩系统在互相垂直施加的直流磁场 H_0 和角频率为 ω 的交变磁场 $\tilde{h} = h_0 e^{i\omega t}$ 同时作用下,当 $\omega = \gamma H_0$ 时,该磁矩系统将从交变磁场中强烈吸收能量的现象称为磁共振。这里所说的磁矩系统可以来自原子核的自旋、电子的轨道运动和电子的自旋运动等。

按照经典物理图像,如果磁矩受到一恒定直流磁场作用,而磁矩方向和该磁场又不互相平行时,磁矩将围绕磁场轴作拉莫进动。它的运动方程可以写为

$$\mathrm{d}M/\mathrm{d}t = -\gamma \boldsymbol{M} \times \boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}} + \boldsymbol{T}_d$$

式中,M 为磁化强度,γ 是旋磁比,H_{eff} 是有效磁场,T_d 是磁共振的阻尼项,一般有三种表达方式:

(1)朗道–栗弗希兹表达式

$$T_d = -(\alpha\gamma/M)\cdot[\boldsymbol{M} \times (\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}})] = -\lambda/M^2[M \times (\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}})]$$

式中,α、λ 是阻尼系数。

(2)修正的布洛赫表达式

$$(T_d)_z = -(M_z - M)/T_1$$

$$(T_d)_{x、y} = -M_{x、y}/T_2$$

式中,x、y、z 是直角坐标系的三个坐标分量,T_1、T_2 分别是纵向弛豫时间和横向弛豫时间。

(3)吉伯特表达式

$$T_d = -(\alpha/M)\cdot(\boldsymbol{M} \times \mathrm{d}\boldsymbol{M}/\mathrm{d}t)$$

式中,α 是阻尼系数。

在热平衡情况下,磁矩最后在磁场力矩的作用下将平行于磁场取向。现在,如果在垂直于稳恒磁场 H_0 的方向上施加一交变磁场 $h = h_0 e^{i\omega t}$,且 $H_0 \gg h_0$,则当满足条件 $\omega = \gamma H_0$ 时,磁矩将从交变场吸收能量维持在一固定的圆轨道上进动,即磁矩系统产生了磁共振现象。

按照量子物理图像,微观粒子系统在稳恒磁场中能级发生分裂,能级间距 $\Delta E = \gamma\hbar H_0$。通常,粒子在占据这些能级时服从泡利原理。同时,在热平衡条件下,由于遵守玻尔兹曼分布,占据低能态的粒子数略微大于占据高能态的粒子数。如果在垂直于稳恒磁场 H_0 的方向上同时施加一交变磁场 $\tilde{h} = h_0 e^{i\omega t}$,且 $H_0 \gg h_0$,则在交变磁场提供的量子能量 $\hbar\omega$($\hbar = h/2\pi$,h 为普朗克常数)和能级间距 ΔE 相等即 $\omega = \gamma H_0$ 时,微观粒子将从低能级跃迁到高能级,大量粒子的这种跃迁就会产生粒子系统从交变磁场强烈吸收能量的现象——磁共振。

根据所研究的微观粒子对象的不同,目前观察到的磁共振有很多,如核磁共振、铁磁共振、顺磁共振、亚铁磁共振、反铁磁共振等。磁共振技术已经成为研究微观粒子系统的磁性、分子结构以及医疗诊断的有力工具。

尺寸共振 dimensional resonance 一磁性样品的磁导率和介电常数分别为 μ 和 ε,当频率为 f 的电磁波沿样品传输时,样品内该电磁波的波长为

$$\lambda = C/f\sqrt{\mu\varepsilon}$$

式中,C 是光速。如果该样品的尺寸恰好等于电磁波半波长 $\lambda/2$ 的整数倍时,就会在样品内部形成驻波,从而出现强烈吸收电磁波能量的现象,称为尺寸共振。

磁力共振 magnetomechanical resonance 如果磁性材料的磁致伸缩系数不为零,则在交变磁场作用下,样品会产生机械振动。当交变磁场的频率和样品机械振动频率相同时,便会出现样品从交变磁场中吸收大量能量的现象,称为磁力共振。

自然共振 nature resonance 如果作用于磁

性材料的外加直流磁场为零，仅对材料施加一高频、弱的交变磁场，则仅仅由于材料内部存在的磁晶各向异性场产生共振，造成电磁波能量大量被吸收的现象，称为自然共振。

铁磁共振 ferromagnetic resonance 磁性材料中的电子自旋磁矩系统在互相垂直施加的直流磁场 H_0 和角频率为 ω 的微波交变磁场 $h = h_0 e^{i\omega t}$ 同时作用下，但 $H_0 \gg h_0$，当 $\omega = \gamma H_0$ 时，该磁矩系统将从交变磁场中强烈吸收能量的现象称为铁磁共振。这是英国物理学家格里菲斯于 1946 年最先在金属 Fe、Co、Ni 中观察到的现象，至今，已在许多磁性材料中观察到铁磁共振。大量实验结果的总结已使铁磁共振成为研究磁性材料动态磁性和测量饱和磁化强度、磁晶各向异性常数的有力工具，同时利用铁磁共振现象可以做成许多微波器件。

当铁磁物质受到互相垂直的恒定磁场 H 和高频磁场 h 作用时，磁化矢量 M_s 的宏观经典运动方程可用朗道-栗弗希茨方程式来描述：

$$\mathrm{d}M_s/\mathrm{d}t = -\gamma \boldsymbol{M}_s \times \boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}} + \boldsymbol{T}_{\mathrm{d}}$$

式中，$\gamma = 1.1051 \times 10^5 \mathrm{g(m/A \cdot s)}$，是旋磁比（$g$ 为 g 因子），$\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}}$ 是作用于铁磁物质的总有效场，原则上，除了高频磁场外，还可来自五种磁场的贡献，即

$$\boldsymbol{H}_{\mathrm{eff}} = \boldsymbol{H} + \boldsymbol{H}_{\mathrm{ex}} + \boldsymbol{H}_k + \boldsymbol{H}_\sigma + \boldsymbol{H}_{\mathrm{d}}$$

式中，$\boldsymbol{H}$、$\boldsymbol{H}_{\mathrm{ex}}$、$\boldsymbol{H}_k$、$\boldsymbol{H}_\sigma$、$\boldsymbol{H}_{\mathrm{d}}$ 分别是外加稳恒磁场，交换场，磁晶各向异性场，应力各向异性场和退磁场。代入运动方程式，可以获得相应的共振条件。例如考虑样品形状各向异性的影响，设想有一小旋转椭球体，三个主轴和直角坐标系的 x、y、z 轴重合，z 轴和长轴一致，稳恒磁场平行于长轴，则磁矩一致进动的共振频率可用基特尔公式表示

$$\omega_0 = \gamma\{[H_0 + (N_x - N_z)M_s][H_0 + (N_y - N_z)M_s]\}^{1/2}$$

式中，H_0 是稳恒场，N_x、N_z、N_y 分别是椭球体沿 x、y、z 轴的退磁因子。

如果描述磁矩在外场作用下运动规律的朗道-栗弗希茨方程式阻尼项 T_{d} 不为零，则可证明，张量磁导率可表示成以下形式

$$(\mu_{ij}) = \begin{vmatrix} \mu & -\mathrm{j}k & 0 \\ \mathrm{j}k & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

而且，式中的对角张量元和非对角张量元均为复数，即

$$\mu = \mu' - \mathrm{j}\mu'',$$
$$k = k' - \mathrm{j}k''$$

由此看出，张量磁导率是一个不对称张量，各个张量元均为复数，它们的虚部表明了材料的损耗。通常，材料的 μ'、k' 在共振场附近变化剧烈，会改变符号，呈现明显的频散现象；μ''、k'' 则在共振场附近出现极大值，它们随稳恒磁场的改变出现一共振峰，即反映了能量的共振吸收。在 μ''-H 图上，当 μ'' 下降至最大值的一半时对应的磁场强度差称为铁磁共振线宽，用 ΔH 表示。

张量磁化率 tensor susceptibility 磁性材料中的电子自旋磁矩系统在互相垂直施加的直流磁场 H_0 和角频率为 ω 的微波交变磁场 $\tilde{h} = h_0 e^{i\omega t}$ 同时作用下，但 $H_0 \gg h_0$，当 $\omega = \gamma H_0$ 时，该磁矩系统将从交变磁场中强烈吸收能量的现象称为铁磁共振。设 H_0 沿 z 轴，h 在 x-y 平面内，共振发生时，磁矩处于强迫进动状态。x 方向上的微波磁场 h_x 不仅引起 x 方向上微波磁化强度 m_x，而且还引起 y 方向上的微波磁化强度 m_y；同样，y 方向上的微波磁场 h_y 不仅引起 y 方向上微波磁化强度 m_y，而且还引起 x 方向上的微波磁化强度 m_x。这种旋磁性决定了在各向同性磁性介质中磁化强度 m 与 h 的关系不再像直流磁化和普通交流磁化的情况那样磁化率是单一实数或复数，而是必须写成一张量，即

$$\boldsymbol{m} = \begin{vmatrix} \chi & -\mathrm{j}\chi_a & 0 \\ \mathrm{j}\chi_a & \chi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} h_x \\ h_y \\ h_z \end{vmatrix} = (\chi_{ij})\boldsymbol{h}$$

式中，可以看到，这时的磁化率是一不对称张量(χ_{ij})，称为张量磁化率。

张量磁导率 tensor permeability 磁性材料中的电子自旋磁矩系统在互相垂直施加的直流磁场 H_0 和角频率为 ω 的微波交变磁场 $h=$

$h_0 e^{j\omega t}$同时作用下，但 $H_0 \gg h_0$，当 $\omega = \gamma H_0$ 时，该磁矩系统将从交变磁场中强烈吸收能量的现象称为铁磁共振。这种旋磁性决定了在各向同性磁性介质中连接磁感应强度 b 与磁场强度 h 关系的磁导率必须写成一张量，即

$$b = \mu_0 \begin{vmatrix} \mu & -jk & 0 \\ jk & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} h_x \\ h_y \\ h_z \end{vmatrix}$$

$$= \mu_0 (\mu_{ij}) h$$

$$(\mu_{ij}) = \begin{vmatrix} \mu & -jk & 0 \\ jk & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

$$= \begin{vmatrix} 1+\chi & -j\chi_a & 0 \\ j\chi_a & 1+\chi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

式中的(μ_{ij})称为张量磁导率。

核磁矩 nuclear magnetic moment 原子核因内部的质子和中子具有固有自旋及其在核内的运动所呈现的磁矩称为核磁矩。如果核的自旋量子数用 I 表示，则核磁矩为

$$\mu_I = g_I [I(I+1)]^{1/2} \mu_N,$$

式中，g_I 是核的 g 因子，只能由实验测定，其数值有正有负。$\mu_N = eh/4\pi M_p$，称为核磁子，是核磁矩的基本单位。h 是普朗克常数。M_p 和 e 分别是质子的质量和电荷。由于质子质量比电子质量大 1836 倍，所以核磁子比电子磁矩的基本单位——玻尔磁子 μ_B 要小 1836 倍，这就造成一般情况下，原子磁矩主要是来自电子磁矩（包括轨道磁矩和自旋磁矩）的贡献。核自旋量子数 I 根据原子核的质量数 A 和电荷数 Z 的不同而不同。对于 A 为偶数、Z 为奇数的原子核，I 为非零整数；对 A 为奇数的原子核，I 为半整数；对 A、Z 均为偶数的原子核，$I=0$。所以，只有在前两种情况下，原子核才有磁矩。

核磁共振 nuclear magnetic resonance 核磁共振最早是由帕塞尔和布洛赫在 1946 年观测到的。这是原子核的自旋磁矩系统互相垂直施加的直流磁场 H_0 和角频率为 ω 的微波交变磁场 $\tilde{h} = h_0 e^{i\omega t}$同时作用下，但 $H_0 \gg h_0$，当 $\omega = \gamma H_0$ 时，该磁矩系统将从交变磁场中强烈吸收能量的现象称为核磁共振。对于氢原子核（质子），旋磁比 $\gamma = 2.675 \times 10^8 \mathrm{A \cdot m^2/(J \cdot s)}$，可知在 1 T 磁场下，共振频率约为 42MHz。对于^{13}C 核，同样磁场下的共振频率约为 10MHz。在强磁性物质中，d、f 电子在原子核处有较强的内磁场，因此不加稳恒磁场也能观察到核磁共振现象。

核磁共振是研究原子核系统磁性、确定分子结构和测量核磁矩、电四极矩、核自旋的有力工具。核磁共振成像装置已被用于医疗诊断。

铁磁共振线宽 ferromagnetic resonance line width 铁磁共振线宽 ΔH 的定义见“铁磁共振”。ΔH 直接反映了微波频率下磁性材料对高频电磁波的吸收性能，一般要求越小越好。在微波频率下工作的磁性材料主要是铁氧体材料，其中，以钇铁石榴石单晶的 ΔH 为最小。

五、磁性材料
Magnetic Materials

磁性材料 magnetic materials 磁学是研究物质磁性的科学。从磁学的观点看，世界上的一切物质都是有磁性的。例如，物质最常见的磁性有逆磁性、顺磁性、反铁磁性、亚铁磁性和铁磁性等五类。其中，前三类属于弱磁性，后两类属于强磁性。通常所说的磁性材料是指在工程技术上得到广泛应用的强磁性材料，主要是指铁磁材料和亚铁磁材料。

磁性材料根据组成可以分成两大类：金属磁性材料和铁氧体磁性材料。前者由大量的磁性金属和合金所组成，后者则是指大量的磁性金属氧化物材料。

根据磁性的应用特点，磁性材料主要可以分为软磁材料、硬磁材料、矩磁材料、压磁材料、磁记录材料和旋磁材料等几类。但是，随着技术的不断发展，一些新材料也应运而生，如磁光材料、磁性液体等。请参考相关词条的说明。

金属磁性材料 metallic magnetic materials 金属磁性材料主要是利用金属（或合金）作为原材料，通过熔炼、浇铸、加工和热处理或者由

数种金属(或合金)粉末通过配比、混合研磨、成型、烧结和热处理等工序所制成的致密体。此外,也包括用溅射、蒸发、化学沉积或电解沉积等方法制成的各种金属(或合金)磁性薄膜和多层膜等具有特种功能的材料。

一般,金属磁性材料根据用途的不同,可以分为以下几种:

(1)永磁合金,如高碳钢、铝镍钴合金、稀土永磁合金等;

(2)软磁合金,如纯铁、铁硅合金、镍铁合金、铁基非晶、钴基非晶、铁基微晶等;

(3)矩磁合金,如镍铁合金;

(4)压磁合金,如纯镍、铁铝合金、稀土铁合金;

(5)磁记录材料,如用作磁头材料的镍铁合金和用作磁记录和磁光记录介质的铁镍钴合金、钴镍磷合金、钴磷合金的金属膜和铽铁钴、钆铽铁合金的非晶态薄膜等。

铁氧体　ferrites　铁氧体是目前实际使用的磁性材料类型之一,一般呈现亚铁磁性,早期因成分中含有氧化铁而得名。按晶体结构分类,主要包括尖晶石型,石榴石型和磁铅石型三大类。

一般,铁氧体磁性材料根据用途的不同,可以分为以下几种:

(1)永磁铁氧体,如钡铁氧体、锶铁氧体等;

(2)软磁铁氧体,如锰锌铁氧体、镍锌铁氧体、镁锌铁氧体等;

(3)矩磁铁氧体,如镍铁氧体;

(4)压磁铁氧体,如镍锌铁氧体、镍铜铁氧体、镍镁铁氧体;

(5)磁记录材料,如用作磁头材料的锰锌铁氧体、镍锌铁氧体和用作磁带记录和磁光记录介质的 $\gamma\text{-}Fe_2O_3$、CrO_2、钡铁氧体等;

(6)旋磁铁氧体,又称微波铁氧体。如钇铁石榴石、铋钙钒石榴石、镁锰铁氧体、锂锌铁氧体等。

尖晶石铁氧体　spinel ferrites　晶体结构类似于天然镁铝尖晶石 $MgAl_2O_4$ 的磁性氧化物称为尖晶石铁氧体。晶体结构具有立方对称性,空间群为 $O7h$。分子式可写为 MFe_2O_4,式中,M 是二价金属离子,如 Co^{2+}, Ni^{2+}, Fe^{2+}, Mg^{2+}, Mn^{2+}, Zn^{2+} 等,Fe 离子为三价 Fe^{3+},可以被其他三价金属离子如 Al^{3+}, Cr^{3+}, Ga^{3+} 等所取代。一个单胞内含有八个分子式,即 $8MFe_2O_4$,一共包含 56 个离子,它们分别占据由四个或六个氧离子所组成的四面体或八面体的中心位置,即四面体座或八面体座,通常也叫做 A 座或 B 座。

根据二价金属离子和三价铁离子在 A 座和 B 座上分布的不同,可将尖晶石铁氧体分为以下三类:

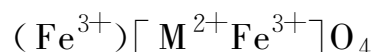
(1)正型尖晶石:二价金属离子占据 A 座,三价铁离子占据 B 座。这种离子分布可以表示如下



$$(M^{2+})[Fe_2^{3+}]O_4$$

其中,圆括号(　)代表 A 座,方括号[　]代表 B 座。

(2)反型尖晶石:二价金属离子占据 B 座,A 座全部由三价铁离子占据,即



$$(Fe^{3+})[M^{2+}Fe^{3+}]O_4$$

(3)混合型尖晶石:二价金属离子部分占据 A 座,部分占据 B 座,即



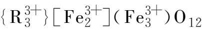
$$(M_x^{2+}Fe_{1-x}^{3+})[M_{1-x}^{2+}Fe_{1+x}^{3+}]O_4$$

式中,x 代表 M^{2+} 占据 A 座的分数。

在通常情况下,占据 A 座的离子磁矩和占据 B 座离子的磁矩是反平行排列的。只有当 A 座离子磁矩为零时,B 座离子磁矩之间才呈反平行排列。由于占据 B 座离子的数目大于占据 A 座离子的数目,因此,反平行排列的 B 座离子的磁矩和 A 座离子的磁矩在大小上是不等的,体现了亚铁磁性的特点。

石榴石铁氧体　garnet ferrites　这类磁性氧化物因晶体结构类似于天然石榴石 $Ca_3Al_2(SiO_4)_3$ 而得名。它们的晶体结构属立方晶系,空间群 $Oh10(1a3d)$。化学分子式为 $R_3^{3+}Fe_5^{3+}O_{12}$,式中,R 是三价稀土离子,如 Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Yb, Lu 等离子和 Bi, Ca 离子及它们的组合。为简单起见,常将石榴石缩写为 RIG,这里,R 代表稀土元素,I 是英语铁(Iron)的第一个字母,G 代表石榴石(Garnet)。例如,钇铁石榴石铁氧体可缩写为 YIG,钆铁石榴石可写为 GdIG 等。

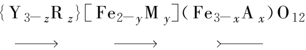
一个石榴石晶胞含有八个分子式。其中，金属离子所占据的位置有三种：四面体座，八面体座和十二面体座，分别简称为 d 座，a 座和 c 座，它们分别是由四个，六个和八个氧离子所包围的四面体，八面体和十二面体的中心位置。一晶胞内，共有 40 个三价 Fe 离子，其中，24 个占据 d 座，16 个占据 a 座；24 个三价稀土离子则占据 c 座。为了充分反映离子分布的特点，通常将石榴石铁氧体的分子结构式写成



$$\{R_3^{3+}\}[Fe_2^{3+}](Fe_3^{3+})O_{12}$$

式中，括号{ }，[ ]，( )分别代表 c 座，a 座和 d 座。

最常见的石榴石铁氧体是钇铁石榴石铁氧体 $Y_3Fe_5O_{12}$(YIG)。由于占据 c 座的 Y^{3+} 离子是非磁性离子，而 a 座和 d 座的铁离子之间存在超交换作用，它们的磁矩是反平行排列的，所以，这种铁氧体的分子总磁矩等于位于 a 座和 d 座的铁离子的磁矩之差。在通常的情况下，占据 c 座的稀土离子的磁矩并不等于零，例如，离子取代后的分子结构式可以表示如下



$$\{Y_{3-z}R_z\}[Fe_{2-y}M_y](Fe_{3-x}A_x)O_{12}$$

式中，R 是离子磁矩不为零的稀土离子，M 和 A 分别代表 Al，V，Ge，Si，In，Zr，Sn 等离子。位于分子结构式下方的箭头代表 c 座，a 座和 d 座离子磁矩的取向关系，即 c 座与 a 座的磁矩是平行排列的，但是和 d 座的离子磁矩互成反平行。因此，总的分子磁矩为

$$M = M_d - M_a - M_c,$$

式中，M_d，M_a，M_c 分别代表位于 d 座，a 座和 c 座的离子合成磁矩。

磁铅石铁氧体 magnetic plumbite ferrites 晶体结构和天然磁铅石 $Pb(Fe_{7.5}Mn_{3.5}Al_{0.5}Ti_{0.5})O_{12}$相似的磁性氧化物称为磁铅石铁氧体，呈六角晶系，空间群为 $D6h1(C6/mmm)$。这一类铁氧体包含许多类型，现将它们的化学分子式、缩写符号、晶格常数及择优取向列于下表。表中，M＝Mg、Mn、Fe、Co、Ni、Zn、Cu 等二价金属离子，Ba^{2+}离子可以被 Sr^{2+}、Pb^{2+}所取代。

类型化学分子式缩写
晶格常数择优取向

类型	分子式	缩写符号	a/nm	c/nm	易轴
M	$BaFe_{12}O_{19}$	M	0.588	2.32	// c
W	$BaM_2Fe_{16}O_{27}$	M_2W	0.588	3.28	// c
X	$Ba_2M_2Fe_{28}O_{46}$	M_2X	0.588	8.41	
Y	$Ba_2M_2Fe_{12}O_{22}$	MY	0.588	4.35	⊥ c
Z	$Ba_3M_2Fe_{24}O_{41}$	M_2Z	0.588	5.23	⊥ c
U	$Ba_4M_2Fe_{36}O_{60}$	M_4U	0.588	3.81	

从该表所列晶格常数 a 和 c 值可以看出，不同类型的磁铅石铁氧体的晶格常数 a 值均相等(0.588nm)，但 c 值却不同，这是因为这类铁氧体的结构是由不同数目的含钡离子层和尖晶石块所组成。其中，尖晶石块包含 4 个氧离子层，一共有 9 个 Fe^{3+}，其中，2 个 Fe^{3+}在 A 座，7 个在 B 座，而每个氧离子层上含有 4 个氧离子；每个钡离子层上含有 1 个 Ba^{2+}，3 个 O^{2-}和 3 个 Fe^{3+}，而这 3 个 Fe^{3+}中，有 2 个在八面体座(B 座)，1 个在六面体座(E 座)。这里说的 A 座，B 座和 E 座分别是指由 4 个，6 个和 5 个氧离子包围的四面体，八面体和六面体的中心位置。在 2 个钡离子层之间夹有一个尖晶石块。

M 型磁铅石铁氧体是重要的铁氧体永磁材料。最常见的有钡铁氧体 $BaFe_{12}O_{19}$和锶铁氧体 $SrFe_{12}O_{19}$两大类。它的晶体结构中，一个晶胞包含两个分子式，即 $2\times BaFe_{12}O_{19}$，沿 C 轴由 2 个尖晶石块和 2 个钡离子层套串而成。每个分子式中的 12 个 Fe^{3+}磁矩之间的相互关系如下所示：

所在位置	A 座	B 座	E 座
钡离子层		2↓	1↑
尖晶石块	2↓	7↑	

这里，有 8 个 Fe^{3+}的磁矩向上，4 个 Fe^{3+}的磁矩向下，而每个 Fe^{3+}的磁矩为 $5\mu_B$，所以一个

分子磁矩为 $5\times(8-4)=20\mu_B$，这和实验值 $19.7\mu_B$ 十分接近。

W 型、Y 型和 Z 型磁铅石铁氧体中 M＝Co 时可发现在一定的温度范围内，垂直于 C 轴的六角平面为易磁化面，可以作为高截止频率的软磁材料得到应用。如 $Co_2Z=Ba_3Co_2Fe_{24}O_{41}$ 的截止频率高达 1500MHz，初始磁导率接近 30。

正铁氧体 orthoferrites　又名钙钛矿型铁氧体。其化学分子式为 $R^{3+}Fe^{3+}O_3$，式中，R 一般为稀土元素。晶体结构属正交晶系，具有层状结构特点，由含 Fe^{3+} 层和含 R^{3+} 层依次叠加而成。

含 Fe^{3+} 层内，正方形的每条棱边中心位置处各有一个 Fe^{3+}，而且，相对棱边上的两个 Fe^{3+} 的磁矩是平行排列的，相邻两边上的 Fe^{3+} 的磁矩是呈反平行排列的。通常，正铁氧体的磁性属成角的反铁磁性。Fe^{3+}-O-Fe^{3+} 之间的超交换作用强，而 R^{3+}-O-R^{3+} 之间的超交换作用弱。随着稀土原子序数的增大，稀土离子半径减小，Fe^{3+}-O-Fe^{3+} 之间的夹角偏离 180° 的程度就越大，超交换作用相应减弱。一般在室温下，稀土离子呈顺磁性，当温度低于 8K 时，稀土离子磁矩才能出现有序排列。

硬磁材料 hard magnetic materials　硬磁材料又称永磁材料。它们一般难以磁化到饱和，但是，一旦在较强的磁场中被充磁以后，如将磁场撤去，就可以保留很强的磁性，而且在使用过程中不易被退磁。高碳钢、铝镍钴合金、稀土永磁合金、钡铁氧体和锶铁氧体都是常见的永磁材料。它们的主要用途是做成永磁体，在一定的空间内提供恒定的工作磁场。利用磁场本身或者通过磁场和载流导体、带电粒子以及涡流等相互作用，使一种能量有效地转变成另一种能量，从而被广泛地应用于精密仪表、电声器件、永磁电机、磁选机、自动控制、微波器件、核磁共振成像仪、粒子加速器、磁耦合传动器等场合。

衡量永磁材料性能的主要指标是矫顽力（或内禀矫顽力）、剩余磁感应强度或剩余磁化强度、最大磁能积和剩磁或矫顽力的温度稳定性。理想的永磁材料应该是具有高矫顽力、高剩磁和高的最大磁能积。

软磁材料 soft magnetic materials　一般在较弱的磁场中即可被饱和磁化并呈现很强的磁性，但在磁场撤去后，磁性也就基本消失的磁性材料称为软磁材料，这一类材料被大量用来制作电力、配电和通信变压器、开关电源变压器、继电器、电磁铁和电感器的铁芯，发电机、电动机的转子和定子、磁屏蔽以及磁路中的导磁材料。常用的软磁材料有纯铁、铁硅合金、镍铁合金、锰锌铁氧体、镍锌铁氧体和镁锌铁氧体等。

衡量软磁材料性能的主要指标有饱和磁化强度，初始磁导率或最大磁导率、磁损耗。理想的软磁材料应该具有高饱和磁化强度、高的初始磁导率或最大磁导率和低的磁损耗。

矩磁材料 rectangular magnetic materials　磁滞回线接近矩形的磁性材料称为矩磁材料。

磁滞回线的矩形度用剩磁比 $R_r=B_r/B_m$ 或方形系数 $R_s=B(-H_m/2)/B(H_m)$ 来表示。这里的 H_m 是指定的最大磁场，$B(-H_{m/2})$ 和 $B(H_m)$ 分别是第二象限最大磁场强度的一半（$H_m/2$）和最大磁场强度（H_m）时的磁感应强度值，B_r 是剩余磁感应强度，B_m 是最大磁场强度下对应的磁感应强度。通常，对矩磁材料，要求 $R_r\geqslant0.9$，或 $R_s>0.8$。由于矩形磁滞回线上有 B_m、B_r 两个稳定状态，因此在计算技术中可用作磁性存储器，在自动控制中作开关元件、磁放大器等，在微波器件中用作固定相移量的锁式相移器。对矩磁材料的总要求是磁滞回线为矩形、合适的低矫顽力、从 $+B$ 状态反转到 $-B$ 状态所需要的磁化反转时间短，足够高的居里温度。磁化反转时间一般定义为材料在反转磁化时感应电压上升到 10% 幅值和下降到幅值 10% 处所相应的时间间隔，又称为开关时间，用 τ 表示。开关时间 τ 和磁化驱动场 H 的关系为

$$S_w=\tau(H-H_0),$$

式中，S_w 是开关系数，与矩磁材料的损耗有关；H_o 是临界磁场。一般要求 S_w 尽可能小，通常为 0.5～1.5 $O_e\cdot M_S$。

在矩磁材料中，实用的铁氧体材料主要为尖晶石型铁氧体，如 Mg-Mn 系、Li-Mn 系、Ni-Mn

系、Cu-Mn系、Li-Ni系等。其中以Li-Mn系铁氧体性能最好；实用的金属磁性材料主要是Fe-Ni合金。

旋磁材料 gyromagnetic materials 在微波频段(10^8～10^{11}Hz)具有旋磁性的材料称为旋磁材料。这类材料在同时受到稳恒磁场(沿 z 轴)和微波交变磁场(沿 x-y 平面)作用时，磁导率是一个二级不对称张量，于是，沿 x 方向的磁感应强度不仅与 x 方向的交变磁场分量有关，而且还与 y 方向的交变磁场分量有关，同样，沿 y 方向的磁感应强度也是由 x 方向和 y 方向的交变磁场分量共同决定。此外，由于张量磁导率的非对称性，会造成入射电磁波偏振面的法拉第旋转、双折射、铁磁共振等现象，这种特性统称为旋磁性或旋磁效应。利用旋磁材料的旋磁性，可以设计出许多能在微波频率下工作的旋磁器件，如隔离器、环行器、相移器、倍频器、混频器、振荡器等。

常见的旋磁材料主要有尖晶石铁氧体和石榴石铁氧体。前者如镁锰铁氧体、锂锌铁氧体等，后者如钇铁石榴石、铋钙钒石榴石等。以上这些铁氧体，可以通过不同的离子代换，如对钇铁石榴石铁氧体 $Y_3Fe_5O_{12}$ 而言，可用In、Sn、Gd、Ge、Zr、Ti、Al、Ca、V等离子去分别取代Fe、Y等离子，从而改变饱和磁化强度值，提高温度稳定性以满足不同使用频率下器件的工作要求。对旋磁材料总的要求是合适的饱和磁化强度、较高的居里温度、高电阻率、窄的铁磁共振线宽等。

磁记录材料 magnetic recording materials 磁记录是用磁的办法将信息记录下来的技术。磁记录有模拟磁记录和数字磁记录两类。前者如录音、录像等，主要要求磁记录材料的剩余磁化强度和输入信号成正比，以保证被记录信号和输入信号之间有较好的线性关系。后者如计算机中所用的磁盘、磁鼓等，它们要求记录信号必须先转换成二进制的"0"和"1"的形式。记录后，磁记录材料只有 $+M_r$ 和 $-M_r$ 两个剩磁状态，这时记录信号和输入信号的线性关系并不重要。

磁记录材料由磁头材料和磁带材料所组成。磁头材料分为金属磁头材料和铁氧体磁头材料两种。金属磁头材料具有初始磁导率高、饱和磁感应强度高的特点，但硬度不高、耐磨性差、电阻率低、高频性能不好。铁氧体磁头材料则正好相反，耐磨性好、电阻率较高、高频性能较好是它们的优点。一般用作音频磁头的金属材料有添加适量Nb、Ti等元素的79%Ni-Fe合金。铁氧体磁头主要采用单晶和热压多晶，一般，低频磁头材料为锰锌铁氧体，高频磁头为镍锌铁氧体和平面六角铁氧体。通常的磁带材料由带基(如厚度10～30μm的聚酯薄膜)和磁记录介质所组成，为了能够长期保留所存储的信息，要求磁记录介质有一定大小的矫顽力(24～64kA/m)、矩形比高、温度稳定性好。一般应用较多的是 γ-Fe_2O_3、Co-γ-Fe_2O_3、CrO_2 以及磁性金属铁、钴、镍及其合金的磁粉。

随着磁记录技术的发展，新型磁头材料和磁记录介质也在涌现。例如，利用磁电阻效应的读出磁头已经实用化，具体材料为具有各向异性磁电阻的 $Ni_{79}Fe_{21}$ 合金薄膜和具有巨磁电阻效应的磁性多层膜。特别是利用巨磁电阻效应的多层膜磁头的使用，大大提高了磁盘的记录密度。新型磁记录介质如钡铁氧体磁粉、稀土-过渡族非晶态薄膜(如Gd-Tb-Fe、Tb-Fe-Co)等。稀土-过渡族非晶态薄膜是实现磁光记录的重要介质材料。磁光记录是一种新型的磁记录技术，它是利用磁记录介质较大的磁光克尔效应来实现信号的写入和读出的，由于介质的磁畴宽度和激光光斑均可控制在1μm左右，所以它的存储密度远大于传统的磁记录介质。

稀土永磁 rare earth permanent magnetic alloys 稀土永磁指的是稀土金属和3d过渡族金属所组成的金属间化合物，它们是目前磁性最强的硬磁材料。至今已发展了三代稀土永磁。第一代稀土永磁材料是 $SmCo_5$ 型，1969年问世，1975年正式投产。它的最大磁能积可达224千焦/米^3。第二代稀土永磁是 Sm_2Co_{17} 型，1979年技术难关被突破。1982年前后，投入大规模生产。现在实验室中取得的最好成绩是最大磁能积达到297千焦/米^3。1983年，第三代稀土永磁合金——钕铁硼合金诞生，其主要成分是 $Nd_{15}Fe_{77}B_8$。目前，实验室样品取得

的最大磁能积已高达大于 450 千焦/米^3。

稀土永磁的制造方法主要有三种：

(1)烧结法：通过真空熔炼取得铸锭，经粉碎、研磨、磁场成型、等静压致密化、在氩气中烧结得到永磁体的方法；

(2)快淬法：把合金溶液喷射到迅速旋转的轧辊表面迅速冷却，利用旋转时产生的离心力甩离轧辊表面得到条带状材料，再通过粉碎、研磨、磁场成型和烧结得到高性能的永磁合金；

(3)粘结法：将高性能的稀土永磁粉末和一些胶黏剂(如橡胶、热可塑树脂或热硬树脂)和润滑剂、增强剂等充分混合，再经成型和固化而得到永磁体的方法。

下表列出了三代稀土永磁合金的典型性能。

三代稀土永磁合金的性能

性能 \ 类别	第一代 $(SmPr)Co_5$	第二代 $Sm(CoCuFeZr)_{7.5}$	第三代 $Nd_{15}Fe_{77}B_8$
剩磁，B_r/T	1.00	1.10	1.21
矫顽力，H_c/(kA/m)	760	760	923
最大磁能积，$(BH)_{max}$/(kJ/m^3)	176	240	280
B_r 温度系数，(%/℃)	−0.04	−0.03	−0.13
密度，d/(10^3kg/m^3)	8.3	8.4	7.4
居里温度，T_c/℃	710	820	312

钕铁硼永磁合金虽然具有永磁性能很好的优点，但缺点是表面容易氧化和热稳定性不太好。表面氧化问题可以通过表面镀镍或镀锌或制成粘结永磁来解决，热稳定性可以通过用钴部分取代铁来改善。此外，寻求新一代稀土永磁也是重要的途径之一。

目前，人们正在研究的热点之一是在 Sm_2Fe_{17}、$SmFe_{11}Ti$ 等多种化合物中掺氮来提高永磁性能，已有很大进展。

1990 年，Coey 等人发现，$Sm_2Fe_{17}N_{3-x}$合金具有优异的永磁性能。根据估测，稀土化合物 $Sm_2Fe_{17}N_3$ 的理论最大磁能积可高达 477.5kJ/m^3，居里温度为 470℃左右，比 Nd-Fe-B 永磁材料高，因此，很快成为研究热点。

Sm_2Fe_{17}具有 Th_2Zn_{17}型晶体结构，但居里温度较低(386K)。当 N 渗进 Sm_2Fe_{17}化合物的八面体间隙位置后，晶体结构保持不变，仅引起晶胞体积发生膨胀，但磁晶各向异性由易面型转变成易轴型，且使磁晶各向异性常数 K_1 增大，同时，因为晶胞体积膨胀，导致 Fe-Fe 原子间距增大，减小了原来化合物中负的 Fe-Fe 磁性原子之间的相互作用，使居里温度升高到 750K。

$Sm_2Fe_{17}N_x$ 化合物的磁性能依赖于 N 含量。研究发现，$x=3$ 时，化合物的粉末通过磁场成型后得到的永磁体性能最好。制备 $Sm_2Fe_{17}N_x$ 磁粉的方法和制备 Nd-Fe-B 磁粉的方法相同，有粉末冶金法、快淬法、氢化歧化法、机械合金化法等。不管哪种方法，最后都得经过球磨将粉体磨细，然后进行渗氮处理。

由于化合物 $Sm_2Fe_{17}N_x$ 在高于 600℃时会不可逆地分解成 SmN、Fe 和 N_2，从而丧失永磁性能，因此，制造永磁体时不能采用通常的高温烧结法。这就决定了这一类材料大多以黏结永磁体的形式出现。黏结剂有树脂类和低熔点金属(如 Zn、Sn 等)两种。一般来说，用低熔点金属做成的 $Sm_2Fe_{17}N_x$ 黏结永磁体性能较低。

另外，使钕铁硼相($Nd_2Fe_{14}B$)和 α-Fe 相或 Fe_3B 相在纳米尺寸上进行复合以制成纳米复合永磁材料可以有效地提高剩磁也是改善性能的方法。它具有很高的剩磁、较高的矫顽力和最大磁能积，据理论推测 $Nd_2Fe_{14}B$/α-Fe 纳米复合磁体的最大磁能积可高达 800KJ/m^3，而且因为稀土含量相对较低，磁体的成本有望降低。这种材料中，通常包含两个相：一个是成分为 $Nd_2Fe_{14}B$ 的硬磁相，一个是成分为 α-Fe(纯铁)或 Fe_3B 的软磁相。正是由于硬磁相

和软磁相之间的交换耦合作用,可以使两相界面附近的原子磁矩以特定的方式排列起来,造成材料剩磁的提高。由于这种交换耦合作用是一种短程相互作用,所以要求材料的平均晶粒尺寸必须控制在 10nm 左右。

非晶态磁性材料 amorphous magnetic materials 目前得到实际使用的非晶态磁性材料主要是带状或薄膜形的非晶态合金。薄带厚度一般为 20～50μm,由快淬法,即将高温下的合金熔液急速喷射到两个互相靠近而又相向飞速旋转的轧辊之间(双辊法)或直接喷射到单个飞速旋转的轧辊表面(单辊法)依靠离心力飞离而制得的。非晶态薄膜主要利用真空蒸发法、溅射法、电解沉积和化学沉积制得。从技术应用上看,主要分为三大类:

(1)过渡金属-类金属非晶态合金:主要由 80%(原子百分比)的 Fe、Co、Ni 等磁性元素和 20%的 B、C、Si、P 等非磁性类金属元素所组成。这类合金薄带显示很强的铁磁性,可用作变压器的铁芯材料。其中,钴基非晶态合金由于饱和磁滞伸缩系数接近于零,具有特别高的初始磁导率。

(2)稀土-过渡族非晶态合金:主要由 Gd、Tb、Dy 等稀土元素和 Fe、Co、Ni 等过渡金属元素所组成,在室温下呈现亚铁磁性。实际使用时多以薄膜形式出现,可用作磁光记录介质材料。

(3)过渡金属-过渡金属非晶态合金:如 Fe-Zr 合金、Co-Zr 合金等。它们的磁性较弱,有的居里温度在室温以下,但是如加入第三种元素,可呈现强的铁磁性。其薄膜可以成为性能优异的软磁材料。

纳米晶软磁材料 nano-crystalline soft magnetic materials 这是一类新型的软磁材料。

通过熔体快淬法(轧辊法)制得的非晶态条带,如被加热到它们的晶化温度以上保持一段时间(这种热处理称为退火),非晶态条带就会开始晶化,内部组织从非晶态向晶态转变。如果控制这种退火处理的温度和时间得当,就能控制条带内部的微观结构,使得已经晶化的晶粒尺寸控制在 10～15nm 的范围内,而且,这些晶粒在形态上是弥散地分布在残余的非晶相之中,这样就可以得到纳米晶材料。例如,成分为 $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ 非晶态合金在 550℃ 退火 1 小时后在最佳磁性能的状态下,内部包含三个相,一是体心立方结构的 FeSi 相,其成分为 20% Si 和 80% Fe(原子百分比);第二相是尚未晶化的残余非晶相,包含大约 10%～15%的 Nb 和 B,约占总体积的 20%～30%;第三相是大大富集的 Cu 团簇。少量铜和铌的加入是使这类纳米微晶成为优异软磁材料的关键。它们都不溶解于体心立方结构的 FeSi 相。但是,Cu 原子团簇在退火早期的形成,使其成为 FeSi 晶粒的成核中心,促进了 FeSi 晶粒的成核。Nb 进入残余非晶相可以阻止 FeSi 晶粒的长大,同时可以在晶化过程中,抑制 Fe_2B 相的形成。如果退火温度高于 600℃,Fe_2B 相就会首先形成,从而导致性能的全面恶化。

对于纳米晶合金,存在一交换耦合长度为 $L_0=[A/K_1]^{1/2}$。这里,A 是交换常数,K_1 是合金铁磁相的磁晶各向异性常数。对于 Fe-Cu-Nb-Si-B 合金,$L_0=35\text{nm}$。当晶粒尺寸小于 L_0 时,相邻晶粒中的磁矩将通过交换作用而趋于平行排列。因此,局部各向异性应对交换耦合长度范围内所包含的晶粒数求平均,于是,材料的有效各向异性常数为

$$\langle K\rangle = K_1(D/L_0)^6 = K_1^4 D^6/A^3。$$

式中,D 是纳米晶粒的尺寸。对于 20% Si-80% Fe 的合金,$K_1=8\times10^3\text{J/m}^3$,由上式算出,对于纳米微晶,平均各向异性常数 $\langle K\rangle$ 将比 K_1 小大约三个数量级,只有 0.5J/m^3 左右,因此可降低材料的矫顽力。由于 Fe-Si 晶粒相和残余非晶相的磁致伸缩系数符号相反(前者为负,后者为正),所以包含这两相的合金的 λ_s 将减小,估计由此可使磁导率提高一个数量级。这种合金的畴壁很厚,假定残余非晶相的磁晶各向异性可以忽略,由畴壁厚度公式 $\delta=\pi(A/\langle K\rangle)^{1/2}$ 算得为 3μm,畴壁厚度远大于晶粒尺寸。由此,沿畴壁厚度方向,包含了大约 200～300 个 FeSi 小晶粒。这种情况和传统材料正好相反,正是这种结构,尽管晶粒尺寸小到只有 10nm,但是两相界面不再可能对畴壁产生较大的钉扎作用。此外,因为 Fe-Si 晶粒

的尺寸为 10nm，而晶粒与晶粒之间的间隔距离为 1～2nm，即残余非晶相的体积分数不大，所以合金的饱和磁感应强度仍可高达 1.5T，比著名的高磁导率的坡莫合金（$Ni_{79}Fe_{21}$）和钴基非晶态合金要高。对于厚度为 18μm 的条带，在惰性气体保护下，于 550℃ 退火 1 小时，FeSi 晶粒尺寸为 13nm，相应的软磁性能为：$\mu_{1kHz}=100000$，$B_s=1.24T$，$H_c=0.5A/m$，损耗远低于坡莫合金，和钴基非晶差不多。

近年来，这类纳米晶合金除了用作软磁合金外，又有了新的用途。因为它们具有巨磁阻抗效应，即当高频电流通过条带的同时，如沿条带再施加一直流磁场，条带交流阻抗的相对变化竟高达 80%～400%，而且显示出很高的磁场灵敏度，因此，成为十分优异的高灵敏磁传感器的新材料。

除了 $Fe_{73.5}Cu_1Nb_3Si_{13.5}B_9$ 外，属于纳米晶软磁材料还有 Fe-M-C、Fe-M-N（M＝Ta，Hf，Ti，Nb，Zr）和 Fe-M-O（M＝Zr，Hf）薄膜等。这些材料是通过溅射法制得非晶态薄膜，然后，将其在一定温度下晶化得到两相组织。一相是晶粒尺寸为 10nm 左右的体心立方的富 Fe 相（bcc Fe），另一相是尺寸为 1～3nm 的碳化物（如 TaC）、氮化物（如 ZrN）或氧化物相，它们分布在邻近晶粒的晶界交叉点处。由于碳化物或氮化物的晶粒尺寸小于富 Fe 晶粒尺寸，富 Fe 晶粒之间的磁性耦合得以维持；又因为碳化物或氮化物的晶粒尺寸远小于畴壁厚度，它们不会对畴壁运动进行钉扎。因此，这类薄膜材料具有良好的软磁性能。典型值为 $\mu_{1MHz}=5000$，$B_s=1.6\sim1.7T$，$\lambda_s=10^{-7}$。Fe-M-O（M＝Zr，Hf）薄膜在高达 100MHz 的频率下仍有高的磁导率，典型性能为 $\mu_{100MHz}=2000$，$B_s=1.5T$，$\lambda_s=(1\sim3)\times10^{-6}$。

恒导磁材料　constant permeability materials

在一定的磁场范围内，磁导率基本上保持恒定的材料称为恒导磁材料。这种材料具有扁斜形的 *B-H* 磁滞回线，由于磁滞回线的上下两支线十分靠近，可以近似看成是一条穿过原点的直线。所以，磁导率 $\mu=B/\mu_0H$ 便可在一定磁场范围内保持恒定不变。

粘结永磁　binding permanent magnets　将各种永磁材料，如永磁铁氧体、铝镍钴和稀土永磁合金的粉末和一些胶黏剂（如橡胶、热可塑树脂或热硬树脂）和润滑剂、增强剂等充分混合，再经成型和固化而得到的永磁体称为黏结永磁。如在磁场中取向成型，可得各向异性永磁体，永磁性能高于经一般成型得到的各向同性磁体。

磁性液体　magnetic fluid　由具有磁性的单畴微粒和特定的基液组成的液态物质称为磁性液体。单畴微粒材料可以是金属磁性材料，也可以是铁氧体。最常用的是 Fe_3O_4 微粒，用化学共沉淀法、机械球磨法、热分解法和电解法等方法制造。一般小于 10nm。基液除水外，还有二酯类、烃类、碳氟类、聚苯醚类等有机溶液，可根据用途的不同进行选择。在制成磁性液体时，磁性颗粒表面涂有界面活性剂，如油酸、脂肪酸，这些活性剂分子的一头能吸附在磁性微粒的表面，另一头能与基液溶剂化，从而可以有效地防止磁性颗粒凝聚，使磁性液体成为均匀的胶状悬浮物质。

磁性液体有许多独特的性质。作为一种胶状悬浮流体，磁性液体可以用于真空密封和动态密封。特别是用于动态密封，优点非常突出。一般来说，常规密封的极限转速约为 300 转/分钟，而将磁性液体放进一旋转轴和静止轴套之间空间组成动态密封后，以 10 000 转/分钟运行较长时间或以 100 000 转/分钟运行较短时间的条件下可以承受 4.1MPa 的压强差。此外，由于表观比重和黏滞性可以通过施加不同磁场来改变，使其可分别用于分离密度不同的材料和用作阻尼器。在扬声器的磁场间隙中注入磁性液体，有利于传热，可提高扬声器的使用功率和改善音质。用磁性液体做成磁性颜料和磁性墨水可分别用于磁性印染和记录设备中。磁性液体组成的薄膜显示出异常大的磁光效应，如磁双折射和磁二色性。例如，当一线偏振光入射到大约 12μm 厚的膜上，沿着偏离偏振方向 45°处施加外磁场，可以看到光透射率随着磁场的增大而增大，同时，透射光呈椭圆偏振，光的主轴转动角大于 50°。类似这样的效应，可用于高速光快门、光传感

器、光调制器等应用中。

磁致冷 magnetic refrigerating 利用磁热效应的原理，根据关系式

$$(\Delta T/\Delta H)_s = -(T/C_H)\cdot(\partial M/\partial T)_H$$

式中，C_H 和 T 分别是物质的定磁场热容和绝对温度，对于一温度为 T 的绝热系统，其中的磁性工质在定磁场下磁化强度 M 随温度 T 的变化率，$\partial M/\partial T<0$，由此可知，上式等号右侧大于零。现在，如果对系统实施绝热退磁，即 $\Delta H<0$，则在等熵条件下系统温度的变化 $\Delta T<0$，即系统温度将降低。这种利用磁性工质的绝热退磁最后实现制冷的技术称为磁致冷。在低温技术中，常利用磁致冷来获得低温和极低温。例如，对于原先温度为 1.3K 的系统，利用 $KCr(SO_4)_2\cdot12H_2O$ 顺磁盐的绝热退磁，将磁场从 1.95T 降到 0.035T 时，最后系统可达 0.05K 的最终温度。此外还可利用一些原子核系统的绝热退磁来获取极低温。例如，利用铜核 ^{65}Cu 和 ^{63}Cu 的绝热退磁，使核自旋系统的温度降低到 2×10^{-9}K。

在室温附近，如何通过磁致冷来实现降温是当前人们重点研究的重要课题之一。关键是寻求在较低磁场下具有大的磁熵变化的铁磁性工质。Brown 利用铁磁性的稀土金属 Gd 作为工质，将其置于 7T 的磁场中，通过绝热退磁，在室温附近使系统温度下降了 14K。但是，7T 的磁场对于实用来说显然是太高了。至今，室温磁致冷样机已有报道，工作磁场 2～5T，仍然较高。

Liquid Crystals
液　　晶

液晶 liquid crystals　液晶作为一种物理现象是在1888年被发现的。当时，奥地利植物学家雷尼策尔(F. Reinitzer)把苯酸脂晶体加热到145.5℃时，发现晶体变成一种乳白色的黏稠液体，但是在加热到178.5℃以后，才变为完全透明的液体。1889年，莱曼(O. Lehmann)观察到了同样的现象，并确认该物质呈乳白色的黏稠液体状态时具有和晶体相似的性质，呈现光学各向异性，因此建议把这种液体称为液态晶体，简称液晶。以后，人们在许多有机物晶体中都发现了类似的现象，即它们在升温和降温过程中，都会出现一些“中间相”。实际上，这些“中间相”既有流动性和连续性的液体特点，又有晶体所具有的各向异性的物理性质，反映出内部分子的某种有序排列，于是人们就把这一类物质统称为液晶。至今，人们发现的液晶化合物已达10 000多种。如按液晶分子的中心桥键及环的特征区分，主要包含苄叉系、偶氮系和氧化偶氮系、苯甲酸酯系、肉桂酸酯系、联苯系和三联苯系、苯基环己烷系、环己基环己烷系、双环己烷系、芳香酯系、脂肪酸系、嘧啶系以及胆甾醇衍生物、手性液晶等。

热致液晶 thermotropic liquid crystals　通常是指由温度所引起，而且只能在特定的温度范围内存在的一类液晶。根据液晶内部分子的有序排列特征，可以分为近晶相(层状相)、向列相(丝状相)和胆甾相(螺旋相)等几种。详见有关词条的介绍。

溶致液晶 lyotropic liquid crystals　通常指的是在具有一定结构特点的有机化合物中加入溶剂后使其溶解而形成的液晶物质。大多数的溶致液晶是一些在疏水性长烃基链一端结合有亲水性极性基的两性化合物的水溶液。例如，由双亲性分子和水组成的体系就属于这类液晶。所谓双亲性分子，就是指在分子结构中同时具有亲水的极性集团和不溶于水的非极性基团(疏水基团)的化合物分子。这类液晶物质广泛存在于自然界，特别是生物体组织，如脑部，神经、肌肉、血液等组织内。溶致液晶的存在范围由浓度和温度共同决定。

近晶相 smectic phase　又名层状相。属于热致液晶的一种，术语来自希腊语 $\sigma\mu\epsilon\gamma\mu\alpha$，意即皂类、润滑脂，表示这类液晶像润滑脂一样黏稠。通常出现的温度范围较低。这些液晶内部包含许多棒状或条状的分子，它们有序排列成层，在每层中，分子的长轴相互之间是平行分布的。该长轴可以垂直于层面，也可以与层面倾斜成角。在同一层中，分子可以自由平移，体现了液体的流动性，但由于呈黏稠状，不允许在相邻层间移动。根据分子相对于层面的取向方式的不同以及发现时间的先后，近晶相可分为 S_A、S_B、S_C、S_D、S_E、S_F、S_G、S_H、S_I 等九种。例如，S_A 相的指向矢是和层面垂直的，而 S_C 相则是和层面斜交的，构成一定的倾斜角。如果相邻分子层中的指向矢围绕层面法线有一螺旋式的规律变化，则称为扭曲近晶相，现已发现有三种，记为 S_C^*、S_F^*、S_H^*，其中 S_C^* 相就是在 S_C 相中添加旋光性分子而形成的。

近晶相液晶具有正的双折射光学特性，即物质沿着平行和垂直于长轴方向上的光折射率 $n_{/\!/}$ 和 $n_{\perp}$ 不相等，而且，光学各向异性 $\Delta n>0$。

向列相 nematic phase　又名丝状相。属于热致液晶的一种，术语来自希腊语 $\nu\eta\mu\alpha$，意即丝状。在用偏光显微镜观察这类液晶时，可以看到丝状组织。液晶通常由长径比很大的棒状分子所组成。分子并不排列成层状，可以在上下、前后、左右方向上平移。分子的长轴方向互相平行或接近平行。这种有序排列的特点使向列相液晶具有正的双折射光学特性，即物质沿着平行和垂直于长轴方向上的光折射率 $n_{/\!/}$ 和 $n_{\perp}$ 不相等，而且，光学各向异性 $\Delta n>0$。分子之间依靠范德瓦耳斯力联系在一起，相互作用较弱。

胆甾相　cholesteric phase　属于热致液晶的一种，术语来自这些液晶大多由胆甾醇衍生物所组成。可以分为甾体液晶和非甾体液晶两类。胆甾醇经酯化或用卤素取代后所形成的液晶属于甾体液晶。分子呈扁平状，排列成层，每层内部分子是互相平行排列的。分子长轴和层面平行，但相邻层的分子长轴方向之间有规则地转过一个小的角度，因此，沿着层面的法线方向看，分子长轴的空间排列形成一种螺旋结构。当分子长轴方向沿层面法线转过360°时所对应的总的层间距称为螺距。螺距长度大致为可见光波长的数量级。

手性液晶是一种非甾体液晶。它的特点是在向列相液晶的分子结构中含有不对称手性中心的碳原子，同样具有胆甾相液晶所特有的螺旋结构。见“手征性向列型液晶”。

胆甾相有左旋和右旋之分，它们实际上是向列相的一种畸变状态。在一定的条件下，胆甾相可以转变为向列相。例如，在胆甾相中加入消旋向列相液晶或非液晶的手性化合物，或者将适当比例的左旋和右旋胆甾相进行混合，或者在电场、磁场的作用下，均可实现这种转变。

由于在整体上形成了特有的螺旋结构，胆甾相液晶具有旋光性、选择性光散射和圆偏振光二色性等光学性质，且能灵敏地随外加电压、温度变化以及吸附气体等因数的影响而变化。此外，它们还具有负的双折射特性，即光学各向异性 $\Delta n<0$。

圆盘状液晶　discotic liquid crystals　异型液晶的一种。堆积成柱状结构的以苯环为核心的圆盘状脂类分子和以三亚苯基核为核心的醚类和脂类分子都会呈现出特异的液晶性质，因此，把这类化合物统称为圆盘状液晶。它们由具有良好对称性的非极性分子所组成，具有负的光学单轴性质，但无旋光性。

重入液晶　reentrant liquid crystals　异型液晶的一种。一些单一和混合液晶的各向同性液体在冷却过程中，会依次发生从各向同性液体到向列相、到近晶相再到向列相的转变。于是，人们把这种在比近晶相更低的温度下能够再次出现向列相的液晶命名为重入液晶。

高分子液晶　polymeric liquid crystals　这是一类分子结构呈自发有序分布的高分子溶液或熔体所组成的液晶材料。属于这类材料的高聚物的分子链中含有棒状或片状结构的介晶基元，使液晶形成刚性或半刚性链结构。它们的相结构包含向列相（如芳族聚酰胺、芳族聚酯等）、近晶相（如聚丙烯酸酯、聚硅氧烷等）和胆甾相（如聚肽、纤维素）等几种。根据结构式中介晶基元位于分子主链还是侧链位置的不同，则可分为主链型、侧链型、主/侧链结合型和碟状等类别。

铁电液晶　ferroelectric liquid crystals　具有铁电性的液晶材料称为铁电液晶。铁电性一般是指铁电体具有的特有性质。由于铁电体晶体原胞中正电荷和负电荷的中心不重合会产生固有的电偶极矩，在居里温度以下，电偶极矩会出现自发极化，在外电场的作用下，铁电体的自发极化可以改变甚至反转方向。如果先将外电场从零增大到饱和电场，降为零，改变电场方向，沿此反方向增大到饱和电场，然后再降为零，再改变电场方向，增大到饱和电场，则铁电体的自发极化随着电场的这一周期性变化将形成一电滞回线，这是铁电性的最重要的特点之一。铁电液晶同时具有铁电性和液晶特性。液晶要具有铁电性，一般需满足一定的条件。例如：①具有近晶相结构，分子长轴与层面法线之间有不为零的倾斜角；②分子中含有旋光性碳原子，并且不是外消旋体；③沿与分子长轴垂直的方向上的偶极矩分量不为零。

最早的铁电液晶是 DOBAMBC（p-癸氧基亚苄基-p′-氨基-2-甲基丁基肉桂酸酯），这是一种具有螺旋结构分子排列的近晶 C 相 Sc^*，内部分子排列成层状，分子长轴与层面法线之间成一角度，沿层面法线看，液晶的指向矢始终在以 2φ 为顶角的圆锥体的侧面上转动，构成螺旋结构。垂直于长轴方向上的自发极化则沿着该圆锥体的底面圆上变化。根据自发极化在底面上旋转方向的不同，铁电液晶有左旋

和右旋之分。至今人们已合成了许多铁电液晶。因为铁电液晶具有自发极化,在电场中分子会受到很大的转矩作用而取向化,从而造成特有的光学性质。利用这样一些特性可以使这类液晶材料在各种类型的高速光开关元件或高清晰度电视中得到应用。

单变液晶　monotropic liquid crystals　一些化合物在升温过程中不会出现液晶态,而只有在冷却时才能转变成液晶态,继续降温则从液晶态再转变成晶体,因此,这种升温和降温循环过程中发生的相变具有明显的单向性。具有这种相变特点的液晶称为单变液晶。

互变液晶　enantiotropic liquid crystals　一些化合物在升温和降温循环过程中,晶体–液晶–各向同性液体的相变是可逆发生的。具有这种特点的液晶称为互变液晶。

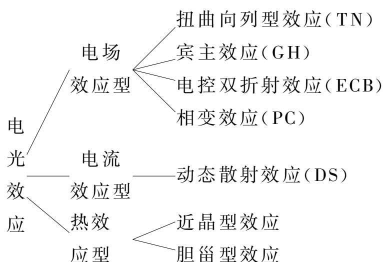
N_n 液晶　N_n liquid crystals　这是一类具有负介电各向异性($\Delta\varepsilon<0$)向列型液晶的总称。在这里,$\Delta\varepsilon=\varepsilon_{/\!/}-\varepsilon_{\perp}$,$\varepsilon_{/\!/}$和 $\varepsilon_{\perp}$分别是沿分子长轴方向和垂直于分子长轴方向的介电常数。

N_p 液晶　N_p liquid crystals　这是一类具有正介电各向异性($\Delta\varepsilon>0$)向列型液晶的总称。在这里,$\Delta\varepsilon=\varepsilon_{/\!/}-\varepsilon_{\perp}$,$\varepsilon_{/\!/}$和 $\varepsilon_{\perp}$分别是沿分子长轴方向和垂直于分子长轴方向的介电常数。

手性向列型液晶　chiral nematic liquid crystals　这是胆甾相液晶的一种,属于非甾体类,具有胆甾相液晶所必需的螺旋结构,但在结构式中不包含胆甾环。它们是把含不对称碳原子的光学活性的烷基或烷氧基等支链连接到一般的向列型液晶化合物的末端而形成的。它们的分子形状、光化学稳定性、介电各向异性、电阻特性等都与向列型液晶相似。

混合液晶　mixed liquid crystals　由于实际应用对液晶材料的性能要求较高,单一液晶材料往往无法满足这些要求,因此必须根据显示方式和相关用途的不同,将两种或者两种以上的液晶材料均匀地混合在一起,组成混合液晶。常见的混合液晶有向列型混合系、胆甾型混合系和向列–胆甾型混合系等。

电光效应　electro-optic effect　液晶在电场作用下内部的分子排列状态将发生变化,从而造成液晶盒的光学性质发生相应变化,这种光被电场调制的现象统称为电光效应。通常包括电场效应型、电流效应型和热效应型等类型,如下图所示。



扭曲向列型效应　twisted nematic effect　对于装有 N_p 液晶、盒厚约为 10μm 的液晶盒,制作时使液晶分子长轴在上、下两块玻璃基片之间连续扭曲 90°,由于扭曲螺距达 40μm,比可见光的波长(0.38～0.78μm)要大得多,所以垂直入射到玻璃基片上的线偏振光在穿过液晶盒时,光的偏振方向将沿液晶分子的扭转方向刚好转过 90°。因此,如果把这样的液晶盒置于两块平行偏振片之间,光线不能通过;如果置于两块垂直偏振片之间,光线就可通过。这种现象称为扭曲向列型效应。它是扭曲向列型液晶显示元件的工作原理,可以实现白色背景黑色图案或者黑色背景白色图案的显示。

如果向列型液晶的分子长轴在上、下两块玻璃基片之间连续扭曲 180°～270°,则会出现超扭曲向列型效应。通过这种液晶盒的线偏振光双折射,可以得到陡峭的电光特性曲线(亮度–电压曲线)。利用这种效应制成的显示器件,结构简单,可实现大面积和高信息密度的显示。

宾主效应　guest-host effect　液晶由宾体和主体所组成。宾体是二色性染料,主体是具有特定分子排列的液晶。二色性染料在可见光通过时,沿分子长轴和短轴方向的吸收是不同的,因此,将这种染料溶解于液晶后,染料的棒状分子会和液晶分子平行排列。如果施加外电场,液晶分子的排列方式便会在电场的作用

下发生改变，于是，带动染料分子的排列方式发生改变。这样，就可以使染料对可见光的吸收量相应改变。这种电光现象叫做宾主效应，它是一种彩色显示方式的工作原理。常用的二色性染料有蒽醌系、偶氮系等。

电控双折射型效应 electrically controlled birefringence effect 向列型液晶盒在电场作用下，由于液晶的初始分子排列状态发生改变，从而引起液晶盒的双折射发生相应变化的现象称为电控双折射型效应。利用这一效应可以实现结构简单而又较为稳定的彩色显示。

相变效应 phase change effect 施加电场时，液晶可以从具有螺旋结构分子排列的胆甾相向具有垂面分子排列的向列相转变或者从向列相向胆甾相转变的相变现象称为相变效应。

动态散射效应 dynamic scattering effect 一些 N_n 液晶具有负的介电各向异性、正的电导各向异性而且电阻率小于 $(1\sim2)\times10^{10}\,\Omega\text{cm}$，当相应的液晶盒厚度不小于 6μm 时，在低频交流电场作用下，如果电压大于某一临界值，会出现与液晶盒厚度相同间隙的周期性的条纹状图案(威廉姆斯畴)，再继续增大电压，这种图案就会演变成不规则的复杂图案，表明液晶分子产生了紊乱运动，入射光受到强烈散射，盒内折射率随时间而改变，这种现象称为动态散射效应。它是液晶显示的主要方式之一——动态散射型显示的工作原理。

热光效应 thermo-optic effect 通过将液晶加热或冷却使其分子排列发生改变，从而造成液晶的光学性质随温度的改变而改变的现象称为热光效应。

电热光效应 electro-thermo-optic effect 液晶的光学性质在温度和电场同时改变的条件下发生改变的现象称为电热光效应。

热色效应 thermochromatic effect 具有螺旋结构的手性液晶，其螺距是随着温度的改变而改变的。由于螺距的改变，又会造成特殊的彩色变化，这种现象称为热色效应。例如联苯型液晶，在低温下彩色随着温度变化的灵敏度高，且性能稳定。通常手性近晶 Sc^* 相和胆甾相随温度变化的规律是正好相反的。随着温度的升高，前者的色彩是从短波长变到长波长，而后者则是从长波长变到短波长。

介电各向异性 dielectric anisotropy 液晶材料的介电各向异性是决定液晶在电场中的行为的主要参数，一般地，用参数 $\Delta\varepsilon=\varepsilon_{/\!/}-\varepsilon_{\perp}$ 来表示。式中，$\varepsilon_{/\!/}$ 和 $\varepsilon_{\perp}$ 分别为平行于和垂直于液晶分子长轴方向上的介电常数。

根据介电各向异性的差别，可将向列型液晶分为两大类：具有负介电各向异性的 N_n 液晶 $(\Delta\varepsilon<0)$ 和具有正介电各向异性的 N_p 液晶 $(\Delta\varepsilon>0)$。

对 $\Delta\varepsilon>0$ 的 N_p 液晶，在电场作用下，当电场强度 E 大于某一临界电场强度 E_c 时，分子长轴将平行于电场方向排列；对 $\Delta\varepsilon<0$ 的 N_n 液晶，当电场强度 E 大于某一临界电场强度 E_c 时，分子长轴将垂直于电场方向排列。临界电场强度 E_c 为

$$E_c=(\pi/d)(k_{ii}/|\Delta\varepsilon|)^{1/2}$$

式中，d 是液晶盒的厚度，k_{ii} 是相应于不同分子排列的弹性常数，如分子沿面排列，$k_{ii}=k_{11}$；如分子垂面排列，$k_{ii}=k_{33}$；如分子呈扭曲排列，$k_{ii}=k_{11}+(k_{33}+2k_{22})/4$。

导电各向异性 conductive anisotropy 液晶的导电各向异性用比值 $\sigma_{/\!/}/\sigma_{\perp}$ 来表示，式中 $\sigma_{/\!/}$ 和 $\sigma_{\perp}$ 分别是液晶中的离子沿平行于分子长轴方向运动时的电导率和沿垂直于分子长轴方向运动时的电导率。一般地，在向列相液晶中，由于沿长轴方向的运动比沿垂直于分子长轴方向的运动要容易的多，$\sigma_{/\!/}/\sigma_{\perp}>1$；而在近晶相液晶中，由于离子容易在分子层之间的间隙中运动，因此 $\sigma_{/\!/}/\sigma_{\perp}<1$。根据导电各向异性的变化，可以分析液晶中的相结构转变。

光学各向异性 optical anisotropy 又称折射率各向异性。液晶是一种不透明的乳白色流体，和许多光学非均匀材料一样，这种状态的出现是由内部存在混乱的折射率涨落所引起的。对于一单轴液晶，由于各向异性的性质，光在其中传播时会产生双折射现象，从而出现两个折射率：n_0 和 n_e，它们分别对应于寻常光和非常光的折射率。寻常光的电矢量垂直于液晶光轴振动，非常光的电矢量则是平行于液晶光轴振动。光学各向异性用参数 $\Delta n=n_e-$

n_0表示。对于近晶相和向列相液晶，$\Delta n>0$，即 $n_e>n_0$，这表明寻常光在液晶中的传播速度大于非常光的传播速度，具有这样特点的液晶称为正光性液晶；对于胆甾相液晶，情况正好相反，$\Delta n<0$，即 $n_e<n_0$，这表明非常光在液晶中的传播速度大于寻常光的传播速度，这样的液晶称为负光性液晶。

由于液晶具有光学各向异性，使人们得以控制入射光沿接近于分子长轴的方向传播，可改变入射光的偏振光状态或方向，或者可使入射偏振光相应于左旋或右旋光进行反射还是透射，因而构成了液晶显示应用的基本原理。

抗磁性各向异性 diamagnetic anisotropy 又称磁化率各向异性。具有棒状分子结构的液晶在外磁场作用下表现出来的磁化率是各向异性的，即沿平行于分子长轴方向的磁化率 $\chi_{/\!/}$ 和沿垂直于长轴方向的磁化率 $\chi_{\perp}$是不相等的，由于两者均为负值，说明液晶在磁场中的感应磁矩和外加磁场的方向是相反的，从而表现出抗磁性的特点，因此把这种各向异性称为抗磁性各向异性。一般，用参数 $\Delta\chi=\chi_{/\!/}-\chi_{\perp}$表示。对一般的向列型液晶，当外磁场超过某一临界磁场 H_c 时，$\Delta\chi>0$，即分子长轴将平行于磁场方向排列。临界磁场值为 $H_c=(\pi/d)(k_{ii}/\Delta\chi)^{1/2}$，式中，$d$ 是液晶盒的厚度，k_{ii}是相应于不同类别形变的弹性常数，对于展曲形变，为 k_{11}；对扭曲形变，为 k_{22}；对弯曲形变，为 k_{33}。

指向矢 director 这是液晶连续体理论中为了描述液晶分子的排列状态和讨论液晶各向异性的物理性质而引入的一个单位矢量，用 $\boldsymbol{n}$ 表示。其物理意义是表示液晶中空间某点附近分子平均取向方向的单位矢量，一般这一方向可以看成是棒状分子长轴或圆盘状分子短轴的择优取向的方向。

有序参数 order parameter 通过特殊的处理可以使液晶分子形成垂面分子排列或沿面分子排列。在实际情况下，不管哪一种排列，液晶分子相互之间不可能是完全平行排列的。为了描述液晶分子长程取向的有序程度，通常定义有序参数如下：

$$S=\langle 3\cos^2\theta-1\rangle/2$$

式中，θ 代表单个分子的长轴方向偏离液晶指向矢的角度，指向矢是指从液晶分子整体上看，沿分子长轴择优取向方向的单位矢量。符号〈　〉表示对空间取平均值。从以上定义可知，对于各向同性液体，分子取向混乱，$S=0$；当所有液晶分子完全平行取向时，$S=1$，一般，只有在 0 K 时，才能实现 $S=1$ 的理想排列。在一级近似下，对于特定的液晶来说，S 只是温度的函数。在较低温度下，S 的最大值为 0.6～0.8。从实用出发，可以利用下列公式来估计 S 的大小：

$$S=(1-\gamma T/T_{\rm Clp})^{\beta}。$$

式中，$T_{\rm Clp}$是向列相–各向同性液体的转变温度，γ 是常数，约为 0.98，指数 β 是决定于具体材料的参数，在 0.13～0.18 之间。实验证明，该式对许多液晶都是适用的。有序参数也可以通过测定折射率、磁化率，或测定紫外、可见、红外等波长范围内的吸收二色性，或测定核磁共振图谱以及从 X 射线衍射等实验求出。

分子排列 molecular arrangement 液晶是由棒状、圆盘状、板条状或梳状分子集团构成的。对于“经典”意义上的液晶而言，大多具有棒状分子结构，至今人们对这些液晶研究得最充分，它们对实际应用也最重要。在一定条件下，这些分子的长轴都可形成相互平行且有特定规则的排列，从而使液晶在平行于和垂直于分子长轴方向上的物理性能，如折射率、介电常数、磁化率、电导率、黏度等出现明显差别，即表现出各向异性。液晶的分子排列由于弹性系数很小很容易受到外界因素，例如电场、磁场和应力等的影响而发生改变。

液晶盒 liquid box 又称液晶显示板或液晶显示器件。在两块相向放置的含钠、钙量低的浮法玻璃板内侧镀上透明导电膜，根据显示方式的不同再在这些电极表面上涂以可使液晶分子按一定方向排列的定向膜，随后在玻璃基板之间注入液晶，加以密封。这样的装置叫做液晶盒。通过施加外电场使液晶分子的排列状态发生改变就可引起液晶盒光学特性的变化，这是液晶盒作为显示板的基本工作原理。

玻璃板的厚度由显示面积、使用要求和具体

规格等决定。手表液晶显示中所用的玻璃片厚度约为0.3mm，随显示面积的增大，玻璃板厚度相应增大。透明电极一般采用金属氧化物覆膜，如NESA膜或ITO膜。为防止液晶溶解玻璃中所含的物质而导致变质，一般在电极和玻璃板表面再镀一层二氧化硅薄膜作为保护层。

在实际应用中，液晶盒有平面排列液晶盒、扭曲向列型液晶盒和垂直排列液晶盒之分。平面排列液晶盒是指液晶盒中玻璃基片上液晶指向矢的取向和玻璃基片表面相平行，而且上下两块基片处的指向矢的取向是互相平行的。扭曲向列型液晶盒是在手表和计算器中常用的液晶盒，其上下玻璃基片处的液晶指向矢取向相对转过一定角度，但分别都和玻璃基片平行。在垂直排列液晶盒中，玻璃基片处的液晶指向矢取向和玻璃基片表面相垂直。

液晶显示装置 liquid crystal display unit 1968年，人们把向列型液晶置于透明电极之间，利用加上电压可使该透明盒变成乳白色，撤去电压又使其恢复透明的性质做成了最早的显示装置。至今，液晶已在数字显示、图形、图像、电视等方面得到了广泛的应用。一般，液晶显示装置由液晶盒、驱动电极及照明装置所组成。液晶本身不会产生彩色光。多色显示的实现必须依靠其他手段才能做到。例如，在彩色液晶电视机中，一种彩色显示方式是采用彩色滤光膜，即每个液晶单元都有一个滤色膜，红、绿、蓝三基色滤色片各对应于一个液晶单元，每三个这样的液晶单元组成一个像素，用专门的照射光源照射这样设计的液晶板就可实现无视差的全色显示。液晶显示装置的工作电压低，图像清晰，且可实现装置的薄型化，体积小、重量轻。目前已广泛用于手表、计算器、仪表、游戏机、计算机显示器、电视等。

Plasma Physics
等离子体物理学

等离子体 plasma 等离子体是由大量的接近于自由运动的带电粒子所组成的体系。它具有消除内部电场的趋势，这种效应称为德拜屏蔽效应，实现这种屏蔽要有一定的距离，这个距离称为德拜长度。如果该体系的尺度远大于德拜长度，粒子间的平均距离远小于德拜长度，那么，该体系在整体上近似地呈电中性（称为准中性），粒子的运动主要由粒子间的电磁相互作用所决定，并具有集体行动，即粒子的运动不仅取决于其附近的局部条件，而且还与远处区域的状态有关，这样的体系称为等离子体。除了电离气体外，金属中的传导电子、半导体中的电子与空穴以及某些液体（如强电解质）也可具有等离子体性质或行为，它们也可被称为固态等离子体或液态等离子体。对于具有过量电荷的这种体系，被称为非中性等离子体。在电离度很低、粒子间作用以带电粒子与中性粒子间的碰撞为主时，可称为弱电离等离子体。据估计，整个宇宙中，约有99%以上的物质都处于等离子体状态。

静等离子体 quiescent plasma 静等离子体是一种很稳定的等离子体，密度和温度较低（如密度可在 $10^{10}\sim10^{12}\mathrm{cm}^{-3}$ 范围、温度约0.2eV），有较长的寿命，并且几乎是完全电离的。通常采用一种叫做“Q（静态）机”的装置来产生静等离子体，等离子体是由碱金属通过接触电离（与温度约为2300K的钨板接触）产生的。静等离子体中发生的一些过程比较单纯，这对于研究各种过程的规律、检验等离子体的理论是很有意义的。此外，还用它来研究漂移波和漂移不稳定性等。

无碰撞等离子体 collisionless plasma 无碰撞等离子体是一种不考虑库仑碰撞效应的理想等离子体。等离子体的温度越高，密度越低，则碰撞越稀少。在这种情况下，无碰撞等离子体往往是很好的近似模型。它可用来讨论碰撞效应可以忽略的物理过程。对讨论特征尺度（或特性时间）小于等离子体的平均自由程（或碰撞时间）的问题时，可以使用无碰撞等离子体模型。

冷等离子体 cold plasma 冷等离子体是等离子体的一种近似模型。它假定等离子体的温度为零，用来讨论热效应可以忽略的物理过程。例如，等离子体中的波，当其相速度远大于平均热速度、同时回旋半径远小于垂直于外磁场方向的波长时，热效应不重要，便可用冷等离子体模型来讨论（这种波称为冷等离子体波）。在实际处理中，冷等离子体模型也可用于高温等离子体。

螺旋波等离子体 helicon wave plasma 螺旋波是一种在磁化等离子体中传播的电磁波。它沿磁场方向传播，是圆偏振的，其回旋方向与载流子在磁场中的回旋方向相同。这种波使得磁力线发生扰动，变为螺旋形的线，故称为螺旋波。螺旋波是色散的，其相速度及群速度均与频率的平方根成正比。用螺旋波激励的等离子体称螺旋波等离子体。这种等离子体具有超常的电离效率，并且是通过外电极放电，因此特别适用于各种低气压等离子体工艺。研究表明，在所有可能在等离子体中传播的波中，螺旋波具有最佳的相速度，使电子通过朗道吸收而被迅速地加热到最佳电离能，从而产生最大的电离密度。实验表明，螺旋波等离子体的最大密度在 $10^{-1}\mathrm{Pa}$ 的压强下可超过 $10^{13}\mathrm{cm}^{-3}$，电离效率最高可达100%。

激光等离子体 laser plasma 有两种含义：(1)指用于产生激光的等离子体。大部分气体激光器是通过气体放电等离子体来产生激光的，这种放电等离子体就称为激光等离子体；(2)指激光辐照气体靶或固体靶产生的等离子体。强激光与物质相互作用时，由于它具有极高的能量密度，可以改变物质的正常状态，产生等离子体，这种等离子体也称为激光等离子体。激光产生等离子体既可用强脉冲激光源以瞬态方式实现，也可用连续激光源来实现。

天体等离子体 astrophysical plasma 宇宙中

绝大部分物质都处于等离子体状态,这些等离子体统称天体等离子体。如地球的电离层、磁层,行星际空间的太阳风,恒星的内部及大气,星际物质及星系际物质等。各种天体等离子体一般都处在极不平静和不稳定的状态,经常激起复杂的集体运动。超新星爆发、类星体、星系核、星系核风及脉冲星周围的等离子体也都处于激烈的运动状态之中。天体等离子体的集体运动(湍流)状态还与一些辐射过程、粒子加速过程、反常输运过程有关。

相对论等离子体 relativistic plasma 如果等离子体中电子的能量很高,以致经典(非相对论)力学对它不再适用,而要用相对论来描述时,这样的等离子体称为相对论等离子体。相对论效应是否重要,取决于 β 与 1 比较不能略去时,相对论效应就变得重要起来。对于电子而言,当能量超过几千电子伏时,相对论效应便开始在某些方面显示出来,而当能量达到几百千电子伏时,将出现明显的相对论效应。

等离子体模拟 plasma simulation 在研究复杂的非平衡态等离子体时,经常遇到多参变量的情况,为了从理论上定量地或定性地描述它们,利用一些互相补充的简化模型常常是很有益的。对于描述不处于热力学平衡的实际等离子体模型的几千个粒子的参量方程,可用计算机求解。这种方法称为等离子体模拟,可用来同时给出这些参量随时间的演变。

等离子体的热力学平衡 plasma thermodynamic equilibrium 若等离子体中,所有粒子都具有麦克斯韦速度分布,并且相同的温度;辐射谱遵守普朗克定律,并且辐射温度等于粒子温度;原子和离子的各种激态的分布遵守玻尔兹曼定律,而在各种离化态之间的分布遵守沙哈定律;同时,还要求密度和磁场的空间分布是均匀的,这种状态称为等离子体的热力学平衡状态。

等离子体动力学 plasma kinetics 一种对等离子体用动力学的观点进行分析研究,揭示等离子体基本性质的理论。但对于等离子体中大量的粒子而言,处于某一速度范围内的粒子数目是遵从统计规律的。当不存在外加电场时,粒子速度主要由温度决定,当存在外加电场时,则粒子的速度还受电场的影响。在这种理论中,将等离子体看成是大量微观粒子的集体效应。利用概率分布函数,联立玻尔兹曼方程或弗拉索夫方程、高频场方程、相对论电子运动方程和麦克斯韦方程,采用线性及非线性方程的数学处理方法,可以求得粒子的平均速度、平均能、波的不稳定性、包散特性、场增长率等一系列宏观参量。

局部热平衡 local thermal equilibrium 通常的等离子体一般不处于热平衡。如果从理论上可将这种等离子体分为一组子系统,其中每一个子系统自身处于热平衡,从一个子系统到另一个子系统,温度是变化的,两个子系统间能流很低,而且,如果有粒子移动,则粒子从一个子系统跑到另一个子系统而达到平衡所必须的弛豫时间又非常小。这种状态的等离子体被称为处在局部热平衡状态,它可以用来研究等离子体中所发出的辐射,也是研究很多输运过程时常用的一种近似模型。

粒子轨道理论 orbit theory of particles 如果等离子体的温度较高,密度较低,粒子间的碰撞较少,可以略去等离子体中粒子间的相互作用,而且电荷及电流的分布在动力学中不起作用;感应场与外加场比起来是小量;认为等离子体是无碰撞的,则等离子体可视为大量独立的带电粒子的集合。从单个带电粒子在电磁场中的运动方程出发,求得单个带电粒子在电磁场中的运动轨道来描述等离子体,这就是单粒子模型,这套理论称为粒子轨道理论。

洛伦兹气体 Lorentz gas 是一种描述弱电离气体的理想模型。在这种模型中忽略电子与电子碰撞以及电子与离子碰撞,只考虑电子与中性粒子的碰撞,并认为离子静止不动,中性粒子具有麦克斯韦分布(或静止不动)。对于完全电离的气体,忽略电子之间的相互作用,并由于离子很重而假定所有离子也都静止不动,电子的运动完全由离子的散射所决定,用这种模型描述的气体叫洛伦兹气体,也称为电子气。

等离子体鞘层 plasma sheath 是指等离子体与器壁或电极接触时,在两者之间形成的过渡区。由于电子跑向器壁的速率比离子大得

多,使绝缘器壁相对于等离子体具有负电位,当到达绝缘器壁的电子流等于离子流时,达到准稳状态,这时器壁的电位约为粒子的动能(除以电荷 e)的量级。在鞘层中,从内到外密度是下降的,电子密度的下降比离子快,是非中性的,同时电势也是下降的,即存在指向器壁的电场。

德拜屏蔽效应 Debye shielding effect 等离子体有一种消除内部静电场的趋势,这种效应是带电粒子通过改变其空间位置的组合而产生的,这种效应称为德拜屏蔽效应。若在等离子体内放入两个分别带有正、负电荷的电极,它们将吸引异种电荷的粒子,排斥同种电荷的粒子,在它们的周围就形成了一层空间电荷层,空间电荷的电量正好与电极上的电荷量相等而符号相反。因此,它们所产生的电场完全被空间电荷的电场所屏蔽,在等离子体内没有电场。这空间电荷层(或称鞘层)厚度,即屏蔽的特征距离,是几个德拜长度的量级,德拜长度的定义为

$$\lambda_D = \left(\frac{kT_e}{4\pi ne^2}\right)^{1/2} = 6.9(T/n)^{1/2}$$

式中 k 是玻尔兹曼常数,T_e 与 n 分别是电子温度与密度。

等离子体频率 plasma frequency 在等离子体中,当电子偏离平衡位置时会出现静电恢复力而形成振荡,称为电子等离子体振荡。其振荡频率称为(电子)等离子体频率。通常记为 ω_{pe},

$$\omega_{pe} = \left(\frac{4\pi ne^2}{m_e}\right)^{1/2}$$

式中 e 为电子电荷,m_e 和 n 分别是电子的质量和密度。

电子回旋共振 electron cyclotron resonance 在外加磁场的作用下电子将作环绕磁力线的运动,其回旋频率为 qB/m,其中 q 的电子电量,B 为磁感应强度,m 为电子质量。如果在垂直于磁场的方向加一与电子回旋频率同频率的电场,则电子绕磁力线的运动与外加电场产生共振,电子从外电场获得能量,这一现象称为电子回旋共振。电子回旋共振频率通常在微波频段。当外加电场频率为 2450MHz 时,可使产生电子回旋共振的磁场约为 875G。由于电子回旋共振可以非常有效地加热电子,因此用这种方法可以产生高密度的等离子体。它们被用于微电子加工的等离子体刻蚀和等离子体化学气相沉积等工艺中。

双麦克斯韦分布 bi-Maxwellian distribution 在等离子体系统中,由于离子之间和电子之间的碰撞率大于离子和电子之间能量均分率,离子和电子之间不能立刻达到热平衡,但是每个组分可以达到热平衡。由于电子和离子各有不同的温度,它们分别服从相应的麦克斯韦分布,这种情况就是双麦克斯韦分布。有磁场时,在一定条件下,等离子体在平行和垂直于磁场的方向具有不同的温度,因而在相互垂直的方向上,粒子的速度分布是相应于两个不同温度的麦克斯韦分布,这也称为具有双麦克斯韦分布。

玻尔兹曼分布 Boltzmann distribution 假设某种粒子的能量分布符合麦克斯韦分布,它所在的空间存在某一对它作用的力场(电场或重力场)时,粒子将产生位移,从而引起这种粒子的密度梯度。在这种情况下,该种粒子的空间密度分布就是玻尔兹曼分布。对于一维空间,这种粒子的空间密度分布可表示为 $\frac{n_x}{n_0} = \exp\left(-\frac{U}{eT}\right)$,式中 n_0, n_x 分别为 0, x 处的粒子密度,U 为粒子在外力场中的位能,k 为玻尔兹曼常数,T 为粒子的温度。

沙哈方程 Saha equation 沙哈方程由 Meghand Saha 于 1920 年导出,其表达式如下

$$\frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} = C\frac{T^{5/2}}{P}\exp(-U_i/kT)$$

其中 α 是气体的电离度,P 是压强,T 是温度,U_i 是气体的电离电位,k 是玻尔兹曼常数,C 是与气体种类有关的常数。

该方程表达在平衡状态下,气体的电离度与气体的温度、压强以及电离电位之间的关系。

拉莫尔半径 Larmor radius 带电粒子在均匀恒定磁场中的运动是由两部分组成的,一部分是沿着磁力线的(纵向)匀速直线运动,另一

部分是围绕着磁力线的(横向)匀速圆运动。这两部分组合起来,就使带电粒子沿磁力线作螺旋运动。带电粒子围绕着磁力线做圆运动的回旋半径,称为拉莫尔半径。通常定义为 $r_0=\frac{v_\perp}{|\Omega|}$,$v_\perp$ 表示该粒子在垂直于磁场方向的运动速率(通常也可以热运动速度估算量级,代表平均拉莫尔半径),Ω 为该粒子的回旋频率。

弗拉索夫方程 Vlasov equation 是动力学方程的一种形式。其中忽略了等离子体的碰撞效应,粒子间相互作用只包括自洽场部分。弗拉索夫方程适用于讨论特征时间远小于碰撞时间(或特征长度远小于平均自由程)的情况。讨论等离子体和微观不稳定性等问题时,常从此方程出发。此方程亦常称为无碰撞的玻尔兹曼方程,或称无碰撞动力方程。

逃逸电子 runaway electron 在等离子体中,运动中的电子与其他粒子发生碰撞而受阻的情况,可看成受到一种动摩擦力影响的结果。当电子速度很高时,随着电子速度的增大,动摩擦力迅速下降。当等离子体中存在一定恒定电场,电子的速度超过某个临界速度时,它所受到的电场加速力将始终大于动摩擦力,于是这些电子进入持续加速的状态,这种电子称为逃逸电子。逃逸电子的能量往往可以很高。例如,在托卡马克实验中,环向电场产生的逃逸电子的能量可以高达几千电子伏以至几十兆电子伏量级。

绝热不变量 adiabatic invariant 在经典力学中,当一个系统具有周期运动时,对一个周期的作用积分 $\oint p\mathrm{d}q$ 为运动常数,其中 p 和 q 是广义动量和广义坐标,它们在运动中具有周期性。如果系统缓慢变化,致使运动并不完全周期性,但仍能很好地定义 $\oint p\mathrm{d}q$,而且运动常数不变,则该运动常数称作绝热不变量。在等离子体物理学中有三个绝热不变量,每一个都与不同类型的周期运动相关。

第一个绝热不变量为 μ,它与带电粒子绕磁力线的周期运动有关:

$$\mu = mv_\perp^2/2B$$

其中 m 是带电粒子的质量,$v_\perp$ 是其垂直于磁场的运动速度分量,B 是磁感应强度。

第二个绝热不变量是纵向不变量 J。考虑在两个磁镜间被俘获的一个带电粒子,它在磁镜间反跳,因而以"反跳频率"作周期运动。纵向不变量 J 在两个转向点 a 与 b 之间的半周内加以定义:

$$J=\int_a^b v_n\mathrm{d}s$$

其中 $\mathrm{d}s$ 是沿磁力线方向的程长元,$v_{/\!/}$ 是沿磁力线方向的速度分量。

第三个绝热不变量为 Φ,它与导向中心在磁场中的周期性漂移有关,由带电粒子在一个漂移周期经过的路程所包围的总磁通量定义。很明显,当磁场变化时,带电粒子将停留在这样一个表面上,使得所包围的磁力线总数保持不变。

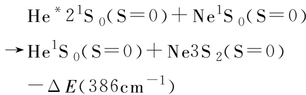
弹性碰撞与非弹性碰撞 elastic collision and inelastic collision 发生弹性碰撞时,碰撞粒子间遵守动量和动能守恒定律,碰撞粒子之间只有动量和动能的交换而无内能的变化。发生非弹性碰撞时,碰撞粒子之间遵守动量和能量守恒定律。碰撞粒子间既交换动能也交换内能,即碰撞前后,粒子的结构或量子态发生变化。由简单的分析可知,若电子与重粒子发生弹性碰撞时,电子几乎不损失能量。若电子与重粒子发生非弹性碰撞时,电子几乎把绝大部分的动能转变为重粒子的内能;若重粒子之间发生弹性碰撞时,碰撞粒子的动能几乎绝大部分转变成被碰撞粒子的动能,若重粒子之间发生非弹性碰撞时,碰撞粒子的动能至多只有一半转变成被碰撞粒子的内能。

碰撞截面 collision cross section 若一投射粒子在一群静止而不规划分布的靶粒子之间运动,这个投射粒子可能和这些靶粒子发生碰撞,若靶粒子的浓度为 n,靶粒子的半径为 r_0,可以截面积为 q 的小圆形靶来代替,我们把 q 称为靶粒子的碰撞有效截面,r_0 为碰撞有效截面的半径,$Q=nq$ 是单位体积内靶粒子的碰撞有效截面的总和。

彭宁电离 Penning ionization 是一种激发原子与基态原子碰撞时,激发原子的内能转移给基态原子并使该基态原子发生电离的过程。

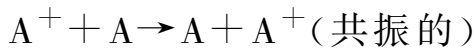
发生彭宁电离的必要条件是激发原子的激发能大于同它相碰撞的原子的电离能，碰撞结果还可以产生激发态的离子。彭宁电离过程中产生的多余能量可转化为电子的动能。例如，氩的$^3P_2$激发态的激发能为11.49eV，汞原子的电离能为10.4eV，因此，氩的$^3P_2$激发态与汞原子碰撞可发生彭宁电离。

共振转移激发　resonance transfer excitation　又称激发能量的共振转移，即激发能从A粒子转移到B粒子，其一般反应式为：$A'+B \Leftrightarrow A+B' \pm \Delta E$，$\Delta E$是粒子$A$的激发能与粒子$B$的激发能之差，上述反应是可逆的。但如果$A'$是亚稳态，而$B$能够自发发射，那么该反应将朝向右的方向进行。这种共振转移发生的概率由ΔE的大小以及维格纳(Wigner)自旋定则所决定，ΔE越小，共振转移截面越大，当ΔE大于0.1eV时，共振转移作用几乎可忽略不计。维格纳自旋定则表明，如果发生共振转移前后两原子体系总的合成自旋保持不变，那么这种反应最可能发生，例如，输出波长为632.8nm的氦氖激光器就是利用$He^* 2^1S_0$与Ne^1S_0发生共振而获得粒子数反转的，其反应式为

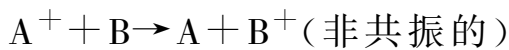


$$He^* 2^1S_0(S=0)+Ne^1S_0(S=0) \rightarrow He^1S_0(S=0)+Ne3S_2(S=0) -\Delta E(386cm^{-1})$$

电荷交换　charge exchange　当离子与中性粒子相碰撞时，离子从中性粒子中夺走电子，结果离子变成中性粒子，而原来的中性粒子变成了离子：



$$A^+ + A \rightarrow A + A^+ \text{(共振的)}$$



$$A^+ + B \rightarrow A + B^+ \text{(非共振的)}$$

这样的过程称为电荷交换。电荷交换的概率与碰撞粒子的性质及其相对速率有关。在受控热核研究中，等离子体的高速离子与低能的杂质原子或冷中性氢原子相碰撞，经过电荷交换过程后变成了快速原子，磁场对它就不再起约束作用，于是它带着能量飞向器壁，造成等离子体的能量损失。相反地，把高能中性粒子注入等离子体，经过电荷交换过程，高能中性粒子变成了高能的离子留在等离子体中，等离子体便被加热，这就是所谓的中性注入对等离子体的加热。

电荷分离　charge separation　在整个等离子体中，通常由于电子和正离子性质不同(具有不同的质量、电荷和压强等)，因而在电场、磁场或重力场的作用下，获得大小与方向均不相同的速度，电子和正离子的电荷密度分布也不同，在等离子体中出现空间电荷，这种现象称为电荷分离。电荷分离是等离子体中的一种重要现象，例如，在波与不稳定性中，或者在粒子扩散过程中，它均起重要作用。

弛豫过程　relaxation process　物质系统由非平衡状态自发地趋于平衡状态的过程称为弛豫过程。当电子、原子或分子的平衡状态受到轻度干扰而发生变化，而后又恢复到平衡状态，所经历的时间叫做弛豫时间。在电离气体中，分子间通过互相碰撞(弹性和非弹性)而交换能量(动能和内能)，但内能的变化往往滞后于动能的变化，经过一段时间后，又达到新的平衡，这也是一种弛豫过程。

等离子体辐射　plasma radiation　是指等离子体中产生电磁波的过程包括从红外到紫外，甚至X射线的大量辐射，按其机理可分为下列几种：(1)轫致辐射：是指自由带电粒子的运动速度发生变化时伴随产生电磁波的过程，所辐射的光谱是连续光谱，在电子温度较高时，连续发光中这种辐射是主要的；(2)复合辐射：电子被离子捕获复合而将多余的能量以光子形式辐射出来，也是连续光谱，当电子温度较低时，这种辐射较显著；(3)回旋辐射：存在磁场时，带电粒子围绕磁力线作回旋运动，具有向心加速度并产生电磁辐射，在温度非常高(10^8K)时，它可超过轫致辐射，而且是线光谱；(4)激发辐射：激发态原子中，电子从较高能级跃迁到较低能级时辐射的光子，所辐射的也是线光谱。

轫致辐射　bremsstrahlung　在等离子体中，当带电粒子由于相互间静电力的相互作用，使参与碰撞的粒子产生加速度而发生电磁辐射。这种辐射称为轫致辐射。轫致辐射的主要来源是电子-离子碰撞时电子的辐射，因为离子的质量大，所以不会有明显的加速。电子-电

子与离子-离子的碰撞也产生类似的辐射，但在数量级上要小得多。后来把凡是由带电粒子因加速运动而产生的辐射都叫作轫致辐射，轫致辐射是受控热核聚变等离子体能量损失的主要机制之一。

剩余电离 remainder ionization 空气中经常存在着极少量的电子和离子，这种自然界产生的不可避免的微弱电离作用叫做剩余电离。它主要由土壤中的放射性辐射和宇宙射线（包括星际空间来的粒子性射线如快速质子、α 粒子、介子等）所引起的。在靠近地面大气中的剩余电离浓度约为每立方厘米 1000 个离子对。剩余电离虽然十分微弱，但它是气体导电空间产生自持放电的原始带电粒子源。

汤生放电理论 Townsend discharge theory 一种描述低气压（约 10^4 帕以下）条件下气体击穿的理论。在极间电场足够大时，电子在电场中获得足够能量使气体粒子产生激发和电离，新生的电子和离子在电场作用下又获得能量产生激发和电离，以致电子向阳极运动过程中带电粒子浓度按指数规律增长，这种现象称电子雪崩或电子繁流。在这过程中所产生的正离子向阴极运动，又会使阴极产生二次电子发射，又增长了电子繁流过程，直至所产生的二次电子发射等于初始电子发射，此时即使撤离外致电离源也能维持放电，由此推得放电自持的条件是：$\gamma(e^{\alpha d}-1)=1$，其中 γ 是正离子轰击阴极的二次电子射系数，α 是电子在电场方向运行单位距离所产生的电离数，即电离系数，d 是极间距离。

流光理论 streamers theory 一种描述高气压（大于 10^5 帕）条件下气体击穿的理论。它是在汤生电子雪崩理论的基础上，考虑空间电荷使电场畸变时电子碰撞电离的影响，以及放电雪崩中的光致电离效应所提出的一种气体击穿理论。它认为在电子雪崩过程中除了产生大量电离外，还有大量激发过程，故伴有强的光辐射，称为流光。所辐射的大量光子横越电极空间，在辐射路线上随机地使气体粒子产生光电离、新生的光电子又会产生次级电子雪崩。大量电离所生成的正离子空间电荷畸变了电场，增强了电离过程，大量激发和光电离导致极间空间产生流光的新生点。在这样的条件下，经过理论分析，也可推得相应的高气压击穿条件，即雷特判据和米克判据，前者是假设电子雪崩中产生的电子都集中在电子雪崩的最前部，后者是假设电子雪崩中所产生的电子是分布在一个球体内。

气体击穿 gas breakdown 在通常状态下，由于宇宙射线等外致电离源的作用，任何气体中都有一定量的带电粒子，在电场作用下形成电流，一旦去掉外致电离源，这种放电就熄灭，故称为非自持放电。由于这种导电性很微弱，因此，一般把常态下的气体看成是绝缘的。当空间电场增加到某一特定值时，由于产生大量电离，电流突然增长，即使去掉外致电离源，气体仍处于导电状态，称为自持放电。由非自持导电转变为自持导电的过程称为气体击穿过程或着火过程。产生这种转变所对应的特定电压称为击穿电压或称着火电压。

辉光放电 glow discharge 是气体导电中的一种重要形式。通常在低气压冷阴极放电室气体击穿后所形成的一种稳定的电流密度较小，而放电维持电压较高的放电形式。它的阴极电子发射机理以离子轰击阴极产生的二次电子发射为主。放电空间往往呈现明暗交替的发光区，其中包括阴极区、负辉区、法拉第暗区、正柱区、阳极区等。随着极间距离的变化，某些光区可以消失，但阴极区是必不可少的。按不同的放电电流，辉光放电又可分为准辉光放电、正常辉光放电、反常辉光放电等三种。正常辉光放电具有稳压特性，即放电电流变化时，放电维持电压基本不变。这种放电通常用于激光、光源、离子器件和微电子加工等方面。

弧光放电 arc discharge 这是一种电流密度大，阴极位降低，发光度强和温度高的气体放电现象，又称电弧。按照其阴极电子发射机理可分为三类：(1)自持热阴极弧光放电：它是由放电电流加热电极而产生电子发射的，一般发生在高熔点电极的情况，电子发射集中在很小的面积上，称阴极弧点，这种放电的阴极弧点往往是固定的；(2)非自持热阴极弧光放电：其阴极电子发射是靠外电源加热来维持的，电子是以整个阴极表面发射出来，不形成阴极弧

点，放电产生的离子主要用来补偿电子空间电荷效应而得到大的放电电流；(3)冷阴极弧光放电：一般由易蒸发金属材料作阴极，典型的例子是汞弧，其阴极电子发射机制是正离子沉积在阴极表面的介质微层上引起的场致发射，其电流密度很大，形成活动的阴极弧点。

火花放电 spark discharge 是一种继续的气体放电现象，其宏观现象表现为明亮曲折而有分支的细带光束，它们在一瞬间穿过放电间隙，马上就熄灭，放电火花细束往往在没有到达电极前就在空间中止。这种放电往往是在高气压(高于 10^5 帕)，而放电电源功率又不够高，气体击穿后不可能维持稳定的放电，只能从非自持放电发展到火花放电。在火花通道里的气体温度非常高，可达 10000K，气体大量被电离，短时间内局部形成高气压，迅速向四周冲击，形成爆炸性现象，同时产生声波。

电晕放电 corona discharge 在较高气压下(约 10^4 帕以上)，由于一个或两个电极表面曲率半径很小，以致电极间电场分布极不均匀，气体击穿后，非自持放电将发展成电晕放电，在曲率半径很小的电极附近，电场很强，有足够的电离和激发，形成一层发光的电晕层，而在电晕层以外的空间由于电场很弱，不足以引起电离和激发，是不发光的暗区(称电晕外区)。因此，电晕放电又是一种非均匀电场下的局部放电。

介质阻挡放电 dielectric barrier discharge 在形成气体放电的电极表面覆盖有一层绝缘介质层，当电极上加以一定电压时，极间电场可以使极间空间的气体分子电离，产生增长的放电电流，所产生的带电粒子在电场作用下沉积在电极表面的介质层上，形成壁电荷电场，又逐渐抵消了外电场，以致使放电猝灭。当极间电场反向时，又会发生上述过程，这种放电称为介质阻挡放电，实际上是一种放电的暂态过程。只有当电极上加以交流时，放电才能准连续工作。在低频工作时，放电特性呈一系列电脉冲。高气压放电时，其形态由许多随机分布的微放电构成。这种放电主要用于臭氧合成、紫外与真空紫外光源、等离子体显示、气体激光器激励以及环保等方面。

空心阴极放电 hollow cathode discharge 是一种特殊的辉光放电，其特征是阴极区、负辉区都被包围在阴极空腔的内部，随着气压的降低，使相对阴极部分的负辉区相互重叠，这种放电状态称为空心阴极放电。在同样的放电条件下(包括气体种类、气压、电极材料等)，空心阴极辉光放电的电流密度比正常辉光放电时显著增大。其机理在于高能电子可在阴极空间来回振荡，从而大大提高电子碰撞的电离系数，重叠负辉区的强烈光辐射导致阴极较强的光电子辐射。高能离子、亚稳原子、高速原子打上阴极的二次电子发射，使阴极总的 γ 系数增大，阴极溅散使低电离电位的金属蒸气由于彭宁电离而降低了有效电离电位。由于上述因素使放电电流密度显著增加。

等离子体输运现象 plasma transport phenomenon 等离子体输运现象是当等离子体处于非平衡状态时发生的宏观现象。例如，当等离子体内部有密度、温度、速度等的梯度或存在电场时，将出现粒子流、能流、动量流或电流等。这些过程称为扩散、热导、黏滞或电导等。它们可导致物理量在空间中的传输，因而叫做输运现象或输运过程。完全电离等离子体中的输运现象有下列特征：(1)输运过程的基本机制是由带电粒子间的电磁相互作用所决定的；(2)恒定强磁场的存在可对等离子体中的输运过程发生实质性的影响；(3)等离子体中的不同成分(电子及各种离子)在输运过程中的表现和作用往往很不相同。

双极性扩散 ambipolar diffusion 密度梯度引起的粒子输运称为扩散，电场引起的带电粒子输运称为迁移。在非磁化等离子体中，电子的扩散系数和迁移率比离子大得多。当等离子体中出现密度梯度时，会引起电荷分离，分离的异种电荷之间引起电场。等离子体中带电粒子在其密度梯度和电场同时作用下的运动状态称双极性扩散，其等效扩散系数称为双极性扩散系数，它主要由离子决定的，比电子扩散慢得多，约为离子扩散系数的两倍。

电子(离子)迁移率 electron(ion)mobility 在外加电场作用下，电子(离子)在气体空间中除了作热运动外，还逆着或顺着电场方向作定

向运动，这种运动称迁移运动。电子（离子）在两次碰撞之间的运动轨迹是抛物线。电子（离子）在单位时间内沿电场方向移动的距离称迁移速度。它与外加的电场成正比，其比例系数就称为电子（离子）的迁移率。

受控热核聚变 controlled thermonuclear fusion 受控热核聚变是一种在人工控制下进行轻核聚变的过程。为克服原子核之间的库仑排斥力实现聚变反应，必须将粒子加热到很高温度（几千万度到几亿度），故称为热核聚变。为使反应能自持，必须将一定密度的反应物约束足够长的时间。反应物在此系统中处于等离子体状态。实现这种反应，现有两种技术路线：磁约束核聚变和惯性约束核聚变。反应的主要燃料是氘，它在海水中的含量极丰富，因此，受控热核聚变一旦成功，将为人类提供非常巨大的能源。

托卡马克 Tokamak 是一种准稳态的环形磁约束受控热核聚变实验装置。等离子体约束在一个轴对称的环形范围内，磁场主要由强的环向场和环向等离子体电流产生的角向场组成。强环向场的作用主要是抑制宏观不稳定性。等离子体的平衡靠角向场维持，加热是靠等离子体电流的欧姆加热。由于在高温时电阻下降，欧姆加热的效率降低，故还采用一些辅助加热手段，如高能中性粒子注入加热、微波加热、绝热压缩加热等。托卡马克是目前最受重视、最有希望首先达到点火的受控热核聚变反应的实验装置。

仿星器 stellarator 一种外加有螺旋绕组的磁约束聚变实验装置。它由一闭合管和外部线圈组成，闭合管呈直线形、“跑道”形或空间曲线形。常见的仿星器具有两对或三对螺旋绕组，前者磁面形状类似于椭圆，后者则近似于三角形。相邻螺旋绕组中通以大小相等方向相反的电流，螺旋绕组产生的磁场和纵向磁场合成后，磁力线产生旋转变换，因而能约束无纵向电流的等离子体。仿星器具有较好的约束性能，但由于所容许的等离子体欧姆加热电流值较小，故所得的温度和密度均低于托卡马克。

激光聚变 laser fusion 指用强激光束来点火的一种核聚变反应。它用几束强激光对称地直接照射到聚变靶丸上，使靶丸内爆，或激光束首先被包围靶丸高 z 包层的黑腔所吸收，再由黑腔发出 **x** 射线来驱动靶丸内爆。前者称直接驱动方式，后者称间接驱动方式。靶丸用充有低密度（$\leqslant 1.0\mathrm{mg/cm^3}$）氘-氚气体的丸壳制成。丸壳由消融层和作为主要燃料氘-氚的内层构成。来自驱动器的能量迅速交给消融层，使其加热膨胀。在消融层向外膨胀的同时，为保持动量守恒，丸层的其余部分被迫向内运动，引起内爆，在极短时间内形成压强高达 10^{12}大气压和温度达 1 亿度的高密度、高温等离子体，在中心热点出现点火，发生聚变反应。

磁约束 magnetic confinement 带电粒子在磁场中绕着磁力线作螺旋运动，磁场越强，粒子回旋半径越小，因此，用强度适当的磁场就能将等离子体束缚住，即阻止等离子体向装置的器壁流失。这种用磁场来约束等离子体的方式称为磁约束。它是实现磁约束核聚变反应的关键技术之一，也是研究等离子体横越磁场和沿磁场逃逸的机理以及减小损失的办法之一。

惯性约束 inertial confinement 是核聚变反应中约束等离子体的一种方式。以等离子体本身的惯性对等离子体进行约束称为惯性约束。惯性约束的原理是：在高温高密度等离子体产生以后，由于等离子体本身的惯性，它可以在膨胀飞散之前维持一个极短的时间完成热核聚变反应，并借此达到劳森条件。氢弹的聚变反应就是利用惯性约束实现的。对于受控条件下的惯性约束聚变的探索，通常采用的方法是利用大功率激光或相对论高能电子束会聚到靶丸上，产生并加热（及压缩）等离子体。惯性约束的时间极短，一般为 10^{-9}秒或更短。为了能在这样短的时间内注入足够多的能量，要求激光束或电子束有极高的功率密度。惯性约束的一个优点是可以省去庞大复杂的磁约束系统。

约束时间 confinement time 磁约束等离子体中不可避免地会出现粒子损失，约束时间定义为总粒子数与粒子的总损失率之比。可以

把约束时间粗略地理解为粒子约束在等离子体内部的平均时间,约束时间越长,表面约束性能越好。当粒子损失由垂直于磁场方向的扩散决定时,约束时间正比于等离子体截面半径的平方,反比于平均扩散系数。

点火条件 ignition condition 指用氘氚聚变反应产生的α粒子 He^{3+}来加热等离子体时,以补偿等离子体的能量损失(韧致辐射损失、热导和粒子从等离子体中逃逸带走的能量损失),使得反应得以继续进行,即 $P_\alpha = P_b + P_L$ 时,这是核聚变反应中等离子体的密度、温度及其能量约束时间应满足的条件。式中 P_α 是α粒子去加热等离子体的功率;P_b, P_L 分别为等离子体韧致辐射损失功率及由热导和从等离子体中逃逸的粒子引起的能量损失功率。当劳森判据中取 $\eta=0.136$ 时,点火条件正好和劳森条件相同。

磁镜 magnetic mirror 是根据在磁场中运动的离子在高于平均磁场强度之处往往被反射回来的原理设计的一种装置。磁镜具有轴对称性,并且沿其轴线有磁场强度梯度的磁场区域。因带电粒子的磁矩是绝热不变量,一个带电粒子向极大场强区域运动时,将受到制动。若该粒子的初速度与磁镜轴的交角超过与磁镜比有关的确定量 Q_c 时,则该带电粒子就能被反射到低通量区域,故称磁镜。磁镜可设计成磁瓶的形式。

劳森判据 Lawson criterion 劳森研究了一个理想循环的脉冲聚变堆中的能量平衡。假定聚变堆中等离子体在聚变反应中所提供的总能量以某一效率 η 转换成电能,并回授给等离子体以补偿其能量损失,使得聚变反应能继续进行。只有当回授给等离子体的能量不小于等离子体的能量损失时,才能进行再循环并获得能量,由此得出的关于等离子体密度 n 与约束时间 τ 的乘积和温度 T 所必须满足的条件称为劳森条件或劳森判据。对于氘-氚反应,$n\tau$ 的最小阈值为 $n\tau=10^{21}$秒·米$^{-3}$, $T=100$ 千电子伏;对于氘-氚反应,$n\tau$ 的最小阈值的 $n\tau=10^{19}$秒·米$^{-3}$, $T=25$ 千电子伏。

磁压强 magnetic pressure 当等离子体中存在磁场时,它与电流的相互作用引起作用于等离子体单位体积上的电磁力 $\boldsymbol{j}\times\boldsymbol{B}$($\boldsymbol{j}$ 为等离子体的电流密度,$\boldsymbol{B}$ 为等离子体中的磁场),这种电磁力可等效于强度为 $B^2/4\pi$ 的沿磁力线方向的张力与强度为 $B^2/4\pi$ 的各向同性的压强之和,后者便称为磁压强。磁压强梯度能反抗等离子体的热压强梯度,因而可利用磁压强来实现对等离子体的磁压缩。

磁力线冻结 frozen-in field line 导电率较高的物质在磁场中作切割磁力线的运动时,该物质内就会产生电流,而这感应电流所产生的磁场又阻止该物质在外磁场中的相对运动。因此,当电导率趋于无穷,则该物质在垂直于磁力线的方向运动时,磁力线就要随物质一起运动。这现象称为磁力线被冻结在物质中,或说电离物质粘在磁力线上。严格地说,磁力线冻结是指:(1)通过和理想导电流体一起运动的任何封闭回线所包围的面的磁通量是常数;(2)在理想导电体中,初始时位于一条磁力线上的流体元,以后一直位于同一条磁力线上。

箍缩效应 pinch effect 等离子体不仅能被外加磁场的约束住,而且也可以被通过等离子体的电流自身的磁场约束住。人们将一线型的固态或流体态的导电体(如一柱体或电离气体柱)由于其本身磁场的作用而被约束的倾向称作箍缩效应。最简单的例子是直线放电,当放电电流很大时,它建立的磁场足以保障不与边界(器壁)接触的等离子体平衡。箍缩效应在磁约束受控热核聚变装置托卡马克中得到了广泛应用。

Z 箍缩 Z-pinch 如果在直放电管两端的两金属电极间施加快速上升的电压,使两电极间产生等离子体电流(Z 轴为等离子体电流的方向),则等离子体电流与其自身产生的角向磁场所产生的洛伦兹力使等离子体快速地沿放电管的径向收缩,等离子体的密度和温度随之快速增加。这种由 Z 向流动的等离子体电流沿径向进行的收缩称为 Z 箍缩,又名纵向箍缩(longitudinal pinch)。Z 箍缩等离子体有较高的密度和温度,但是电极溅散出的物质要污染等离子体,使温度急速下降,并且还会产生扭曲型或腊肠型不稳定性,使等离子体柱瓦解。如果将直放电管弯成环形,并加上导体壳,则

可弥补以上不足，此时等离子体电流沿着环轴方向流动。这种 Z 箍缩称为环形 Z 箍缩。

等离子体中的波　waves in plasma　是以等离子体为介质的波动现象，其具体特征是由介质的性质决定的。等离子体中的波模式极为丰富多彩，可包括如下特性：(1)不仅包括粒子的振荡，而且包括电磁场的振荡，两者互相耦合在一起；(2)恒定磁场的存在对等离子体中的波有实质性的影响，如导致各向异性，引起许多新的波动模式等；(3)组成等离子体的电子与离子的性质有显著差异，使得它们在波动过程中的作用有很大不同；(4)等离子体中的波往往具有很强的色散性；(5)等离子体的不均匀性使波的特征发生变化，并导致新的波动模式；(6)动力效应往往对等离子体中的波有实质性的作用，所谓动力效应主要指作无规热运动的粒子与波场之间的一种共振耦合，它可导致波的无碰撞阻尼，在非平衡等离子体中，还可引起波的不稳定增长；(7)非线性效应往往起重要作用等等。

电子等离子体波　electron plasma wave　在等离子体中，当电子偏离其平衡位置时，电荷的积累破坏了电中性，产生静电场，电子在这种静电场的作用下被拉回到平衡位置。由于电子的惯性，电子将越过平衡位置向相反方向偏离，于是就形成电子围绕其平衡位置的静电振荡，这种振荡称电子等离子体振荡，又称朗缪尔(Langmuir)振荡。由于粒子的热运动使得电子等离子体振动荡能够在等离子体中传播，所形成的波称为电子等离子体波或称朗缪尔波。热运动导致振荡的传播可以这样理解，当电子从振荡区以热速度流到相邻的区域时，它将携带着振荡区中相应的信息，从而使这个区域也发生振荡，或者，也可理解为电子的振荡是通过电子的热压强的起伏而传播的。电子等离子体波是一种静电波，它的相速度高于电子平均热速度。电子等离子体波只有当其频率比等离子体频率高时，才能在等离子体中传播。

离子波　ion wave　离子波是指等离子体中的低频静电波。离子和电子基本耦合在一起，在波的传播方向作纵向振荡，这与中性气体中的声波相似，但离子和电子是靠两者间的微小电荷分离所引起的静电场耦合在一起的。这种振荡引起了离子热压强的扰动，于是提供一部分恢复力。另一方面离子相对于电子的移动破坏了电中性，出现了静电场，对离子的振荡提供了另一部分恢复力。但电子并不是固定不动的。静电场拉着电子以与离子相同的位相振荡，于是这一方面削弱离子振荡所出现的电场，另一方面造成电子压强的扰动，它对电子的作用力与电子所受的电场力能够互相平衡。离子波在长波情形下称为离子声波。在离子声波中，离子的疏密振荡所形成的空间电荷和电场大部分被电子的相应振荡所消除。因此，在离子声波中，电子和离子可看做是一个整体，振荡的惯性主要是离子提供的，而振荡恢复力包括电子压强和离子压强两部分，特别是在离子温度远低于电子温度时，离子声波主要靠电子压强传播。

等离子体冲击波　plasma shock ware　冲击波是未扰流体(无冲击波流体)与冲击波经过后的流体之间的定常过渡区，冲击波过渡区通常可近似地当作流体性质的间断面。等离子体冲击波是一种在等离子体中传播的冲击波。对平行于磁场方向和垂直于磁场方向传播的冲击波是指以高于快磁声波(离子声波)相速度和速度相对于波阵面前方介质传播的间断面。该面前后两个区域(无冲击波区域和冲击经过后的区域)中的速度、压力、磁通量、密度和温度都不同。由波阵图中能量耗散过程的性质不同，可将冲击波区分为磁流体动力学冲击波和无碰撞冲击波。

哨声波　whistler wave　哨声波是等离子体中波的一种模式，是在研究来自电离层的无线电波辐射时发现的。当在南半球出现闪电时，会产生各种频率的无线电噪声，其中存在能在电离层和地磁层传播的右旋波，这些波沿地磁场磁力线传到北半球而被探测到。由于频率高的群速度大，故高频信号比低频信号先到达，从而出现下降的声调。一次闪电可以出现数个哨声，因为信号可沿长度不同的磁力线传播过来。

漂移波　drift waves　等离子体通常是不均

匀的，存在着密度、温度、压强、杂质浓度、磁场强度等梯度，与此相应地在垂直于磁场和梯度方向有各种漂移流和电流。漂移波就是由不均匀性和梯度漂移流支持的波，它主要在垂直于磁场及梯度的方向传播，其相速度一般是粒子逆磁漂移速度的量级，因此叫做漂移波。在实际的等离子体中，常存在一些不稳定的漂移波，称为漂移不稳定性。漂移运动的动能可转移到漂移波中，使之增长。由于漂移波中粒子有垂直于磁场方向的振荡，因此，不稳定的漂移波或漂移波流可导致横向输运的增强。这是出现反常输运现象的一种重要原因。

等离子体激元 plasma lacer 等离子体振荡以波的形式传播，其能量是量子化的。这种由等离子体振荡中等离子体电荷密度起伏引起的通过等离子体传播的能量量子叫做等离子体激元，其能量等于 hw_{pc}，w_{pc}是等离子体振荡频率。

朗道阻尼 Landau damping 带电粒子对在等离子体中传播的电磁波产生的一种无碰撞阻尼作用称作朗道阻尼。在等离子体中传播的电磁波将部分能量转移给带电粒子，而不是由于波引起带电粒子的碰撞而消耗能量。这种阻尼作用首先是由朗道通过理论计算提出的，后得到试验验证。在等离子体中那些运动速度与电磁波的速度接近的带电粒子可以通过朗道阻尼从电磁波中获得能量。

等离子体不稳定性 plasma instability 在等离子体中出现某种扰动时，如果扰动的强度随时间而增长，则称等离子体具有不稳定性。这种不稳定性是极为普遍的，由于一般都不处于热力学平衡状态，所以具有过高的自由能，从而导致扰动增长的源，包括热运动能，有序运动能，场能速度分布对麦氏分布的偏离等等。等离子体不稳定性的类型很多，例如，宏观不稳定性与微观不稳定性，静电不稳定性与电磁不稳定性，绝对不稳定性与对流不稳定性，线性与非线性不稳定性，碰撞与无碰撞不稳定性，均匀与非均匀不稳定性等等。

能量原理 energy principle 是一种判断等离子体不稳定性的方法。在等离子体中，如果任何偏离等离子体平衡位形的扰动都导致整个体系势能的增大，则这种平衡位形是稳定的，反之，如果存在某种扰动使势能减少，则扰动可以从势能中吸取能量使扰动能不断增长，这就是不稳定情形。这里，等离子体的势能包括等离子体的内能和等离子体区及真空区的场能。能量原理可以判别平衡位形是否稳定，但不能确定不稳定的模式和增长率。

等离子体诊断技术 plasma diagnostic technique 测量等离子体各种参量的方法称等离子体诊断技术。其诊断方法可分为被动和主动两类。被动诊断是测量等离子体发射的电磁波或粒子，这些辐射提供了有关电子温度、离子温度、杂质、逃逸电子等各种信息。测量从等离子体发射出的各种粒子，如电荷交换产生的中性粒子、聚变产生的电子等可得到有关离子温度等信息。这类诊断方法对等离子体本身无扰动或扰动很小。主动诊断是人为地对等离子体施加某种扰动，如电探针、微波和激光探针、粒子束探针等各种形式的探针，引起等离子体的响应，测量由此产生的信号。这类方法或多或少地扰动等离子体原有的性质，但比被动方法灵活并能给出更多的信息。等离子体诊断是一种综合性很强的技术，为分析所得的结果，还必须对等离子体中的各种物理过程有基本的了解。

朗缪尔探针 Langmuir probe 把一根除了端点工作部分以外其余部分均用绝缘材料覆盖的细金属丝插入等离子体内部，使其端点工作部分与等离子体接触，而另一端通过一可调电源与产生等离子体的电极相连，改变这金属丝对等离子体的电位，按照带电粒子在拒斥场作用下的波尔兹曼关系可确定等离子体温度和密度等重要参数，这样的金属丝称为朗缪尔探针(又称电探针)。它的适用条件是：没有磁场；带电粒子的自由程大于探针尺寸；被测带电粒子的速度分布符合麦克斯韦分布；四周空间电荷层厚度小于探针尺寸；探针表面不产生二次电子发射。

等离子体光谱学 plasma spectroscopy 在等离子体中，当电子从某一高能态跃迁到另一低能态，自由电子复合到束缚态，自由电子在离子的库仑场作用下从高能态变为低能态时，都

会产生电磁辐射。辐射的形式可包括线状光谱、带状光谱和连续光谱。因此，等离子体光谱学是以原子物理和等离子体物理为基础的，研究等离子体光谱的一门学科。通过对等离子体光谱的研究，可确定等离子体的参数及其他各种物理过程的联系，研究辐射传输和能量损失问题，以及建立可靠的原子参数系统。

等离子体加热 plasma heating 用来增加等离子体中粒子的平均能量（即温度），从而获得高温等离子体的方法称为等离子体加热。不同类型的核聚变装置，加热等离子体的方法也不同。如对于磁约束准稳过程，可用欧姆加热、高能粒子注入加热、绝热压缩、波加热等方法来加热等离子体；对磁约束快的过程，则用激光加热和绝热压缩加热的方法；对惯性约束，又可用激光加热、电子束加热及激光爆聚加热方式。

等离子体推进 plasma propulsion 航天器和其他飞行器的一种推进方法。它用电场或磁场来使正负电荷的粒子都加速到非常高的速度并向后喷出，以便产生推力。等离子体推进比常规的推进剂具有重要的潜在优点，特别对于持续数月或甚至数年的长距离飞行，更是如此。等离子体推进装置有许多种，有的是用短脉电流运行的，而有的则是连续的。连续运行装置的优点在于可少带一些像电容器这样的辅助装备。

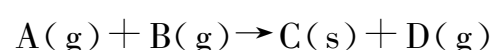
等离子体加速器 plasma accelerator 一种利用电弧、磁场、行波或其他各种手段，将电磁能转化为等离子体的动能以产生高速等离子体射流的装置。其基本原理是外界提供电流通过洛伦兹力使导电流体加速。等离子体加速器可用于等离子体实验、热核聚变研究等方面。

磁流体（MHD）发电 magnetohydrodynamic (MHD) generation 磁流体发电是利用高温导电燃气流（等离子体）通过位于强磁场中的通道、切割磁场而产生感应电动热并使流体减速，这种方法可以把热能直接变换为电能，无需经过机械能变换的中间阶段，因而不需用转动部件，同时，磁流体发电可以有较高的工作温度。鉴于上述原因，磁流体发电效率较高，可达 80% 左右，大约是普通发电机效率的两倍。磁流体发电还可减轻热污染及粉尘、废气的污染。磁流体发电除利用法拉第电流外，还可用霍尔电流来代替法拉第电流，这种发电机称为霍尔发电机。

磁流体动力学 magnetohydrodynamics 是研究导电流体在电磁场中运动规律的一种宏观理论。它是把流体力学与电动力学相结合来描述磁场中导电流体动力学的一种理论，因为等离子体可以看做导电流体，其运动通常总与电磁现象结合在一起，等离子体的某些行为只和它的宏观平均性质有关，故可近似地用磁流体动力学来描写。磁流体动力学的主要应用对象是等离子体。磁流体动力学的基本方程也可由等离子体的微观（即统计的）方程——动力学方程以及电磁方程组取适当的平均推导出来。

等离子体化学气相沉积 plasma chemical vapour deposition 等离子体化学气相沉积是一种制备薄膜材料的方法。它借助等离子体具有高活性的特点，使含有薄膜组成原子的气态物质发生化学反应，在基片表面生成所需的薄膜材料。

一般的化学气相沉积反应通式为



$$A(g)+B(g)\rightarrow C(s)+D(g)$$

如果采用传统的热分解方法，通常需要较高的工艺温度，而等离子体方法可以大大降低工艺温度。例如采用 ON_2 和 SiH_4 制备 SiO_2 薄膜，通常的化学气相沉积方法要求 800℃ 以上的工艺温度。如果这个反应在等离子体中进行，则在常温下就可以得到高质量的 SiO_2 薄膜。

Relativity
相对论

相对论 relativity 相对论是物理学的一个普遍理论，主要由爱因斯坦所建立。它对经典理论的绝对时空观念作了根本性的变革，在对物理定律的推广和在物理学的一些重要分支和宇宙论方面，具有深远的意义。该理论经历了两个重要发展阶段。1905 年爱因斯坦建立了狭义相对论，它的基础是狭义相对性原理和光速不变原理。狭义相对论中没有处理引力。1915 年，爱因斯坦建立了广义相对论，他利用非惯性系的等价场与引力场之间的等效原理，处理引力的存在对物理定律所产生的影响，提出了物质系统引力场的度规应满足的引力场方程，从而建立了相对论性的引力理论——广义相对论。（见“狭义相对论”、“广义相对论”）

一、狭义相对论
Special Theory of Relativity

狭义相对论 special theory of relativity 人们已知，牛顿经典力学是满足伽利略相对性原理的，即牛顿运动方程在任意两个惯性系之间的伽利略变换下保持不变。从某种意义上讲，这也是一种相对论性的理论。牛顿力学建立后，取得了一系列的辉煌成功，在 200 多年中的表现几近完美。之后，牛顿力学出现了一些裂隙，而其中大多数（不是全部，例如行星近日点的进动现象）与极高速度（与光速可以比拟）的运动有关。在极高速度情况下，质点的力学规律和牛顿力学产生了显著的背离。另一方面，在物理理论的又一个大领域中，麦克斯韦建立了完整的电磁场理论，对光的本性又有了更深入的了解。但是，电磁场理论却并不满足伽利略相对性原理。光在真空中的传播速度在不同的惯性系都相同，这和伽利略相对性原理是不可调和的冲突。许多物理学家将不变的光速看成是对绝对静止的参照系——所谓的“光以太”——而言的，但一系列旨在检测以太的实验却都失败了，它们却反而启示所有惯性系的动力学等效性。爱因斯坦为解决这些矛盾提出了完整的理论体系，这就是 1905 年创立了的狭义相对论。他解决问题的方案与同时代的物理学家不同，不是就事论事的去“修补”理论，而是从最小量的事实资料出发，导得最深刻、最深远的结论。他的方案是：坚持所有惯性系在一切情形下都是等效的信念，但运动定律和变换定律必须修改。狭义相对论的理论体系，就构筑在两条基本原理之上。第一，狭义相对性原理：物理定律在一切惯性参考系中具有相同的形式。第二，光速不变原理：真空中的光速是一个普适常数。相对性原理保持了，但变换定律改变了，现在联系任意两个惯性系之间的空间、时间的坐标变换，不再是伽利略变换，而是洛伦兹变换。这个变换正是光速不变原理所要求的，它自然保证了真空中的光速在一切惯性系中都相同、是个普适常数的实验事实得到满足。从相对论的运动学原理出发，爱因斯坦将牛顿力学改造成相对论性力学，它既能完美地解释物体在极高速运动时的力学规律，又在低速运动时以牛顿力学作为其极限形式。相对论性力学和麦克斯韦电磁场理论，现在一起满足狭义相对性原理，在任意两个惯性系之间的空间、时间坐标的洛伦兹变换下保持不变。狭义相对论，深刻地变革了牛顿、伽利略的绝对的时-空观念，认为同时性是相对的，依赖于所考虑的参考系，预言了运动时钟走时率变慢的时间膨胀效应和运动物体在运动方向上收缩的洛伦兹收缩效应。狭义相对论在原子、原子核和高能物理领域中得到了广泛的应用。

参考系 reference system 几乎所有物理学定律都是表述一定的物体在空间的位置是怎样随时间而变化。一物体的位置或一事件发生的地点，只有参照另一适当选择的物体，才能表达出来。在河中行驶的船的位置，只有相对于其他物体，比如说河岸，才能说清。牛顿

虽然相信有绝对空间,但他认识到人们无法描绘出物体在绝对空间中的运动路径,只能“使用相对而非绝对的位置和运动”。作为一个物体位置和运动的参照的这个物体,就称为参考系。参考系选定后,在这参考物体上建立一套坐标系,并将一个时钟固定在这坐标系统里。坐标系用来决定物体在空间的位置,时钟用来指示相应的时间。因此,人们往往就把这个空-时坐标系统称做参考系。

惯性系 inertial system 若在一个参考系中,一个自由运动的物体,即一个无外力作用的运动物体,保持其原来相对于参考系为静止或作匀速直线运动的状态,则将这样的参考系称作惯性系。牛顿虽然认识到物体位置和运动的相对性,但他相信存在与物质和运动无关的“绝对空间”,这是一种“绝对不动”的空间,而他的运动定律就是对“绝对参考系”而言的。伽利略指出,对绝对参考系作匀速直线运动的参考系,牛顿运动定律都能成立。因此,换句话说,惯性系就是牛顿运动定律在其中成立的一切参考系。实际上,牛顿的“绝对空间”和“绝对参考系”是不存在的,绝对意义上的惯性系也是不存在的。在实际问题中,可以根据需要选取适当的“实物”作为惯性系。比如,地面上的物体运动,在许多情况下,完全可以忽略地球在绕日轨道上的公转和绕地轴的自转对物体运动的影响,牛顿的运动定律能很好地描述、预言物体的运动,这时把地球视为一个惯性系就是一个很好的选择。但对于另一些物体的运动,例如著名的傅科摆,再把地球当作惯性系,不考虑其自转的影响,就不正确了。因为在这种情况下,牛顿运动定律并不成立,必须要加上所谓的惯性力,才能继续应用牛顿运动定律来描述、预言物体的运动。

如果两个参考系彼此相对作匀速直线运动,而其中的一个又是惯性系,则另一个显然也是惯性系,一个自由运动的物体相对于它也将作匀速直线运动。由此,我们可以有无数个作相对匀速直线运动的惯性系。

非惯性系 noninertial system 相对于惯性系作加速运动的参考系,称为非惯性系。在非惯性系中,牛顿运动定律并不成立。如果要让牛顿运动定律继续成立,就必须在物体所受的真实的其他物体给予的作用力之外,加上与参考系自身的加速运动相关的所谓“惯性力”。

观测者 observers 相对论文献中的观测者,他们的作用是对事件发生的地点和时间作出判断。几乎总是把观测者描述为相对于某惯性系是静止的。设想每个惯性系都有一位观测者,人们便能用图表示一个实际过程,以得到同一事件的两种不同的空时描述。但是,在使用这一语言中包含某种危险,比如将“观测者”理解成“观看者”。依附于一个惯性系中的观测者,就是指按该参考系规定所进行的测量。爱因斯坦曾经指出,观测者的作用仅仅是记录符合(coincidence),亦即记录发生在同一空时点上的一对事件。在某参考系的一个特定点上,那里的时钟读数就是这样一个事件。一个物理事件(比如两物体之间的碰撞)可以看做是与时钟读数事件相符合而发生的事件。

一个观测者不仅可用自身参考系中的仪器进行测量,也能接收其他参考系中测量所得的结果和信息。比如在通过某车站的运动列车参考系的测量中,他不仅可用自身仪器测量出通过车站这一事件的地点和时间,也可接收站台(另一参考系)上相应的时钟读数和离某处多少公里的指示牌表达的位置信息。

“一个 S 参考系的观测者看到事件发生的地点 x 和时刻 t”这样的陈述,应正确理解为按 S 系中的测量所确立的一个事件的时间、空间坐标。不能理解为 S 系中的观看者看到事件发生的位置和时间是 x 和 t。真实的看,必定要牵涉到额外的特征,即信息由一点到另一点的传输特征。单一的观看者,不能同时处于不同的地点;在某一时刻,他只知道发生在他所处位置的事件。

因果性 causality 物理中的因果性关系,是指作为原因的事件,必定早于作为结果的事件,这种先后关系是绝对的,不因观察者的不同、描述事件的惯性系的不同而改变。因果关系的这一特性称为因果性。

不变式 invariant 一个方程在坐标变换时,其中的每一项均保持不变,从而整个方程保持不变,称为相应坐标变换下的不变式。

协变式 covariant 一个方程在坐标变换时，虽然每一项都发生了改变，但都按照相同的变换规则变换，从而使方程在新坐标系中继续成立，称为相应坐标变换下的协变式。

协变原理 covariant principle 如果陈述一个物理原理所使用的物理方程必须是某类坐标变换下的协变式的形式，则就称这样的物理原理为协变原理。

伽利略变换 Galileo transformation 经典力学中联系任意两个惯性系之间的坐标与时间的变换。它的基础是牛顿的绝对时空观念。他认为时间是普适的，对一切惯性系都是一样的，认为物体的大小与特殊的参考系无关，在不同的惯性系里都是相同的。如果惯性系 $S(o-xyz)$ 和 $S'(o'-x'y'z')$，两者的坐标轴相互平行，在 $t=t'=0$ 时原点相重合，S' 系以匀速 v 沿 x-轴正向相对于 S 系而运动，则满足上述要求的同一事件的空时坐标在两个惯性系中的伽利略变换关系为

$$\begin{array}{lcl} x'=x-vt & & x=x'+vt \\ y'=y & \text{或} & y=y' \\ z'=z & & z=z' \\ t'=t & & t=t' \end{array}$$

相应的速度变换是

$$\begin{array}{lcl} u_x'=u_x-v & & u_x=u'_x+v \\ u_y'=u_y & \text{或} & u_y=u_y' \\ u_z'=u_z & & u_z=u_z' \end{array}$$

由此可见，速度不是伽利略变换下的不变量。相应的加速度变换是

$$a_x'=a_x$$
$$a_y'=a_y$$
$$a_z'=a_z$$

由此可见，加速度是伽利略变换下的不变量。

伽利略相对性原理 Galileo principle of relativity 经典力学中的相对性原理。它断言：力学定律在所有惯性系中都是一样的。换句话说，描述力学定律的方程是惯性系之间伽利略变换下的不变式。

牛顿力学是满足伽利略相对性原理的。牛顿运动定律 $F=ma$，在伽利略变换下是不变的。物体的加速度 a 是这一变换下的不变量 $a'=a$，如果物体间的相互作用力仅为两物体距离的函数，而与其速度或加速度无关，则它在伽利略变换下也是不变的，$F'=F$。物体的惯性质量也是伽利略不变量，$m'=m$。这样，牛顿运动定律在惯性系 S' 中保持不变，即有 $F'=m'a'$。

其实，伽利略相对性有许多等价的说法。伽利略说“如果相对于某个参照系，岩石被松开时是静止的，那么测得的岩石下落路径永远是铅垂线”。这就是他的相对性原理的具体体现。

但是必须注意，还有许多力学量并不是伽利略变换下的不变量，比如物体的速度。在不同的惯性系中观测同一物体的运动，得到的结果可能是不同的。比如，从匀速航行的船和固定的岸这两个不同的参照系中，观测岩石从桅杆顶上自由下落的运动，前者测得的岩石轨迹是铅垂线，后者测得的是抛物线。不过，在两个参照系里，它们遵从的牛顿运动定律都是相同的 $F=ma$。一个理论满足相对性原理，是指该理论的基本方程在相应的坐标变换下保持不变。（见“伽利略变换”）

绝对空间 absolute space 牛顿时空观中的空间概念。他认为，空间是刚性的，两点间的距离与任何特殊的参考系无关。换言之，用以测量距离的尺是刚性的，其长短不受其运动状态的影响。也就是说，这支尺的长短，在运动状态不同的惯性系中观察的结果是一样的。这种空间观念体现在任意两个惯性系之间的坐标变换上，表现为伽利略变换。在某一时刻 t，空间中两点 P_1 和 P_2，在惯性系 S 中的坐标分别是 (x_1, y_1, z_1) 和 (x_2, y_2, z_2)，在惯性系 S' 中的坐标分别是 (x_1', y_1', z_1') 和 (x_2', y_2', z_2')。它们之间的距离

$$S_{12}=[(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2]^{1/2}$$
$$=[(x_2'-x_1')^2+(y_2'-y_1')^2+(z_2'-z_1')^2]^{1/2}$$

是伽利略变换下的不变量。（见“伽利略变换”）

绝对时间 absolute time 牛顿时空观中的时间概念。他认为，时间是绝对的，与任何特殊

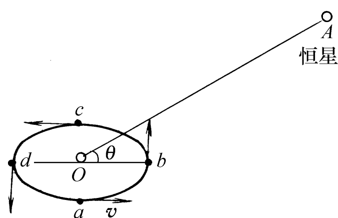
的参考系无关。牛顿说："绝对的、真正的和数学的时间本身，就其本性而言，是不受任何外在事物的影响而均匀流逝的。"换言之，时钟的走时率不受其运动状态的影响，静止安放在不同惯性系中的时钟，它们对同一运动过程的计时结果是相同的。在任意两个惯性系之间的坐标变换上，它反映为伽利略变换，时间 t 是伽利略变换下的不变量：$t'=t$。(见"伽利略变换")

以太 ether　以太是物理学发展历史上的概念。在对光的本质的长期探索中，一直存在着粒子理论和波动理论这两种明确定义的模型。毕达哥拉斯(Pythagoras)在公元前6世纪首先提出光的粒子模型，能很好地解释光的直线传播和光能完全自由地通过真空这些事实。1667年，虎克(Robert Hooke)又提出了另一种理论，即光是通过某介质传递的振动。随后，惠更斯(Huygens)明确提出了光的波动理论，并用其解释光的反射和折射现象。日常经验中的波动需要介质，而光又具有衍射、干涉、偏振等不容否认的波动性质，因此，科学家把这种介质取名为以太，并设法进行探测。1675年罗麦(Roemer)第一次测定了光速，已经确认光具有极高的速度。光以太的假设与这个事实很难调和。因为，光的极高传播速度，必定要求光以太在离开平衡位置时，产生极强的恢复力。但光以太又应非常的稀薄，因为行星可以年复一年地从中穿过而又不会引起任何可探测到的速度损失。1861年，麦克斯韦(James Clerk Maxwell)提出了光的电磁波理论。借助于介质的可测量的电和磁性质，可以预言光在任何给定介质中的速度，尽管以太的性质还是十分神秘，但在以太和普通物质之间的鸿沟似乎不像原先那么大了。许多科学家因此依然坚持将电磁波认同为媒质振动的传播过程，以太是电磁波的载体，电磁波是以太的应力波或应变波。但是，一系列旨在探索、检测光以太的实验，却都以失败而告终。为揭示地球穿过以太的运动而设计的每一个实验，都给出了相同的结果，似乎地球相对于以太的运动并不存在，或者以太本身并不存在。

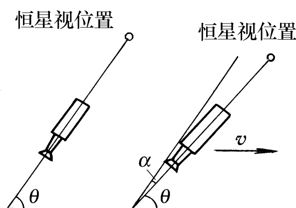
爱因斯坦在发展相对论时，曾经证明寻找光以太的努力是不会有结果的，也是不必要的。实际上，电磁波是在空间传播的交变电磁场。虽然光是以太介质振动的传播过程是一种被证明是错误的认识，但它在物理学发展的历史上产生过重要影响。

光行差 aberration　在地球上观察恒星，一年内其视位置所发生的改变，称为光行差。1725年英国天文学家布喇德雷(James Bradley)，通过观察恒星位置因地球绕日运动引起的表观变化来测定恒星距离。他希望用地球轨道直径作基线，并以实质上与测量员所用的三角测量法相同的方法来测恒星距离。其中，他发现了光行差现象。如下页图中(a)所示，画出了地球在绕日轨道上以3个月为间隔的四个典型位置 a、b、c、d。一颗位于 A 的恒星与太阳的连线为 OA。在与地球固联、但其坐标轴方向在空间固定的坐标系中，观察到的恒星表观位置描绘出一个以恒星真位置为心的椭圆。这一现象不是由于地球在绕日轨道上的不同位置引起的视差，而是由于在轨道上不同的运动速度引起的，即恒星的光行差现象。光行差现象的原理如下页图(b)所示。一架位于静止不动的地球上的望远镜，为了使来自恒星的光线能够沿望远镜的轴线行进并在视场的中心成像，它必须以真实的角度 θ 对准该行星。但是，位于正在运动的地球上的望远镜，要对准恒星，则应当倾斜与 θ 稍有不同的角度 θ'。这两者之差，就是光行差角 $\alpha=\theta-\theta'$。这就像以速度 w 垂直下落的雨滴，在以速度 v 行进中的车厢窗玻璃上将沿与垂直方向倾斜成角度 $\tan^{-1}(v/w)$ 的直线下落一样。在位置 a 和 c 时，地球速度 v 与 OA 成角度 θ。在位置 b 和 d 时，地球速度 v 与 OA 成直角，此时的光行差角具有极大值：$\alpha\approx v/c$。而在位置 a 和 c 时，光行差角 $\alpha\approx(v\sin\theta)/c$，小于 v/c。所以，恒星表观椭圆轨道的长轴(用角度 2α 量度)等于 $2v/c$，短轴等于 $2v\sin\theta/c$。长轴对所有的恒星而言都是相同的，而短轴的长度取决于太阳到恒星的连线 OA 与地球轨道平面的夹角 θ。光行差现象用光的粒子模型很易解释，就像下落的雨点。但要解释成在光以太中穿行的波动时，则必须假定以太完全不受

地球运动的干扰。如果地球附近的以太随地球而动，那就不会发生光行差现象。



(a)



(b)

光行差示意图

在相对论中，要解释光行差角 $\alpha \approx (v\sin\theta)/c$ 很容易。取太阳的静止系为 S，地球的静止系为 S'，后者以轨道速率 v 相对于前者运动。于是，从地球轨道平面内测得的某恒星方向在 S 系中为 θ，在 S' 系中为 θ'，光行差角 $\alpha=\theta-\theta'$。我们有 S 系中入射光的两个分量 $u_x=-c\cos\theta$，$u_y=-c\sin\theta$。按爱因斯坦速度合成律，在 S' 系中的相应分量为

$$u_x'=\frac{-c\cos\theta-v}{1+(v\cos\theta)/c}$$

$$u_y'=\frac{-c\sin\theta/\gamma}{1+(v\cos\theta)/c}$$

可算出在 S' 系中的合速度同样也是 c，即 $u'=c$（这是相对论的特征）。光在 S' 系中的方向是

$$\cos\theta'=\frac{-u_x'}{c}=\frac{\cos\theta+v/c}{1+(v\cos\theta)/c}$$

$$\approx\cos\theta+(v\sin^2\theta)/c$$

另一方面，我们知道，光行差角就是 $\alpha=\theta-\theta'$，α 是一个极小的角度。因此又有

$$\cos\theta'=\cos\theta\cos\alpha+\sin\theta\sin\alpha\approx\cos\theta+\alpha\sin\theta$$

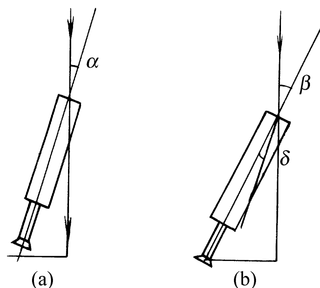
两方面比较，就有

$$\alpha\approx v\sin\theta/c$$

这和布喇德雷的观测结果相同。（见“爱因斯坦速度合成定律”）

曳引系数 drag coefficient 菲涅耳（J. A. Fresnel）依据光将被介质部分曳引的假定，认为运动介质的速度 v 将有 f 分数的部分 fv 带给光。f 称为曳引系数。他建议用实验方法来测定介质的曳引系数值。曳引系数是信奉以太假设的科学家为解释某些光现象而引入的。

艾里实验 Airy experiment 这是旨在检测地球穿过以太运动的实验之一。它是一种改进的光行差实验（见“光行差”）。他以通常的望远镜和注满折射率为 n 的水的望远镜瞄准同一恒星。假设用望远镜瞄准一颗真正方向 OA 与地球轨道平面成直角的恒星，令未知的光行差角为 α（如下图中(a)所示），地球的穿过以太的未知速率为 v，则 $\alpha\approx v/c$。现设想望远镜筒充满了水。因为光在水中行进要慢于在空气中，所以光线穿过镜筒的时间将增加 n 倍。因此，为保证恒星的像位于视场中心，应当使望远镜倾斜一个比原来 α 更大一点的角度 β。这一调节量（$\beta-\alpha$）可以用来测量速度 v。光从空气中进入望远镜筒的水中，将发生折射，其方向将折向镜筒轴线，两者夹角为小于 β 的 δ（如图(b)所示）。



艾里实验

按光的折射定律，

$$n=\sin\beta/\sin\delta\approx\beta/\delta。$$

由于光在水中的速度为 c/n，而望远镜的横向速率为 v，所以要将恒星像调到视场中心的条件就是

$$\delta \approx v/(c/n) = nv/c$$

因此，

$$\beta \approx n\delta \approx n^2 v/c$$

$$\beta - \alpha \approx (n^2 v/c) - (v/c) = (n^2 - 1)v/c$$

除了 v 之外，上式中其他各量均能直接测得，由此应可测出 v 来。但是，艾里实验得到的，是一种颇为出人意料的零结果：充水前后望远镜的倾角没有变化，$\beta - \alpha = 0$。实验结果显示，地球相对于以太似乎是静止的。

这一零结果，若用光的曳引系数来分析，可得出 $f = 1 - 1/n^2$ 的结论。菲佐实验用正效应直接测定了曳引系数，证明了以上的关系。(见"曳引系数"、"菲佐实验")

菲佐实验 Fizeau experiment　这是直接测定光的曳引系数的实验。菲佐在 1851 年用如图所示的装置进行他的实验。光源 S 发出的光被分束器 P(涂有半透明金属镀层的倾斜放置的玻璃板)分成Ⅰ和Ⅱ两束，经过适当放置的三块反射镜 M_1、M_2、M_3，两束光沿矩形 $PM_1M_2M_3$ 以相反的方向行进，回到 P 处会合，光束Ⅰ中有一部分透射进入望远镜筒 T，光束Ⅱ中有一部分反射进入 T，两者在那里形成干涉条纹。为了测定运动介质部分曳引光的效应，在 M_3M_2 和 PM_1 路径中设置水流速度为 v 的水管。光束Ⅰ始终与水流反向，光束Ⅱ始终与水流同向。除在两水管中的光程有差异外，两束光的其他部分光程是相同的。这光程差可用两束光通过水管的时间差 Δt 与真空光速 c 的乘积表示。设运动水流的曳引系数为 f，故水曳引光束获得速度 $\pm fv$，逆水光束Ⅰ通过水管的总速度为 $(c/n - fv)$，顺水光束Ⅱ的总速度则为 $(c/n + fv)$。所以，两束光的时间差为

$$\Delta t = \frac{2l}{(c/n - fv)} - \frac{2l}{(c/n + fv)} \approx \frac{2ln}{c}\left(1 + \frac{fnv}{c}\right) - \frac{2ln}{c}\left(1 - \frac{fnv}{c}\right) = \frac{4n^2 fvl}{c^2}$$

用光之波长 λ 来度量光程差 $c\Delta t$，得到

$$\delta = \frac{c\Delta t}{\lambda} = \frac{4n^2 fvl}{c\lambda}$$

用实验观测得到的 δ 值及参数 l, v, λ, n 之值代入，得出 f 的观测值为 0.48，与由公式 $f = 1 - 1/n^2$ 的计算值 0.43 相符合。由此而得的光在运动介质中的传播速度是

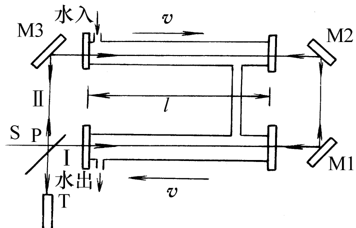
$$u = (c/n) \pm v(1 - 1/n^2)$$

当介质逐渐稀薄时，$n \to 1$，$u \to c$。结论就是，光在真空中的速度是普适常数 c，与所用的惯性参考系无关。而按伽利略的速度合成公式，应是 $u = c \pm v$。

实际上，以上光在运动媒质中的传播速度公式，在相对论中利用爱因斯坦速度合成定律立即可得。设实验室参考系为 S，与运动媒质水相对静止的参考系为 S'，则光在 S 系中的速度 u，在 S' 系中的速度为 $u' = c/n$，S' 系的速度为 v，它们之间的关系是

$$\begin{aligned} u &= (u' + v)/(1 + vu'/c^2) \\ &= (c/n + v)/(1 + v/nc) \\ &\approx (c/n)(1 + nv/c)(1 - v/nc) \\ &\approx (c/n)(1 + nv/c - v/nc) \\ &= (c/n) + v(1 - 1/n^2) \end{aligned}$$

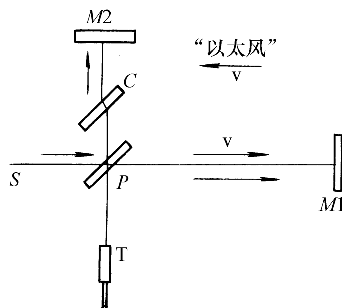
可见，完全用不到什么曳引系数这些额外的概念，相对论就能自然地解释实验的结果。在相对论创立前，曳引系数的概念是很神秘的。爱因斯坦很重视它，它在引导爱因斯坦建立相对论的过程中，曾起过相当大的作用。(见"曳引系数"、"艾里实验"、"爱因斯坦速度合成定律")



菲佐实验示意图

迈克尔逊–莫雷实验 Michelson and Morley experiment　迈克尔逊和莫雷于 1887 年设计的一个旨在检测作为绝对参考系的以太的光学实验，试图用光干涉仪检测到地球穿过以太的运动。在这之前，有些科学家将电磁波视为以太振动的传播过程，以太是传播电磁波的媒

质，它就是一个静止的、绝对参考系。地球显然并不绝对静止，而以一定速度 v 相对于以太运动，因此地面上的光源向不同方向（例如和地球运动方向相同、相反或垂直）发出的光线对地面应具有不同的速度。为了检验这种认识的正确与否，迈克尔逊和莫雷设计了具有高精确度的干涉实验仪器，比较光线在平行和垂直地球运动方向上的视速，以检测地球相对于绝对参考系的运动。



迈克尔逊-莫雷实验示意图

如图所示，来自光源 S 的光线，落到倾斜放置的玻璃板 P 上。由于玻璃板正面敷有半透明的金属，致使入射的光束在那里被分成两部分。一部分经折射后穿过玻璃板到达反射镜 M_1，然后沿原路返回到最初发生分裂的地方，其中的一部分经玻璃板反射进入望远镜 T。另一部分光线被玻璃板 P 反射到反射镜 M_2 上，然后返回到玻璃板 P 上原先发生分裂的地方，类似地其中的一部分将进入望远镜 T。第二束光的中途设置一块补偿玻璃板 C，目的是使这束光在与第一束光会合并进入望远镜之前，同样曾通过一个与后者相同厚度的玻璃板，以保持两部分光线在光学上的对称性。两部分光线所经光路，不同的地方仅在于一束往返于 P、M_1（距离 l_1）和另一束往返于 P、M_2（距离 l_2）之间，其他光路部分两者是相同的。这样，如果光源使用的是单色光，则在望远镜中将能观察到干涉条纹。整个装置可在图形平面中自由旋转。第一次观测时，让地球相对于以太的速度 v 沿着 PM_1 的方向。第二次观测时，让装置旋转 90°，使两部分光束的地位互换一下。如果两部分光线到达望远镜 T 的时间差在这两次观察中的数值 Δt 和 $\Delta t'$ 不相同，那么，预期在第二次观察时，看到的干涉条纹相对于第一次观察所看到的会有移动。

我们在与地球固联的干涉仪的参照系中进行计算。"以太风"具有速度 $-v$。第一次观察时，第一束光线从 P 到 M_1，按伽利略速度合成定律，将有合速度 $c-v$；从 M_1 返回 P 的合速度为 $c+v$。它在其间往返一次所用时间为

$$t_1=l_1/(c-v)+l_1/(c+v)$$
$$=2l_1c/(c^2-v^2)$$

第二束光在 PM_2 之间往返，它的合成速度为 $(c^2-v^2)^{1/2}$，往返一次所用的时间是

$$t_2=2l_2/(c^2-v^2)^{1/2}$$

两者的时间差 Δt 在 $v\ll c$ 的条件下，近似地为

$$\Delta t\approx 2(l_1-l_2)/c+2l_1v^2/c^3-l_2v^2/c^3$$

在装置旋转 90 度后的第二次测量中，类似地有时间差 $\Delta t'$

$$\Delta t'\approx 2(l_1-l_2)/c+l_1v^2/c^3-2l_2v^2/c^3$$

两个时间差的差异是

$$\Delta t-\Delta t'=(l_1+l_2)v^2/c^3$$

时间差的这一改变，将导致干涉条纹移动 δ 条纹，其中

$$\delta=\frac{(l_1+l_2)v^2}{\lambda c^2}。$$

这一现象，在干涉仪的精度内，是可以观测到的。但实际测量得到的却是零结果。用迈克尔逊的话说："对这些结果的解释是，干涉带并未发生移动。""静止以太假设的结果就这样被证明为错误。"

在此实验中，干涉仪的两臂长度相等，当仪器旋转 360°时都无条纹移动发生。旋转操作仅需数分钟，在这段时间内，实验室的运动状态并无显著改变。因此，这一零结果证明了一个命题：相对于穿越空间具有某任意未知运动的参照系，光在所有方向上的速率是相同的。

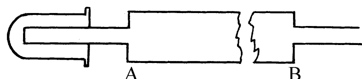
在 1932 年，肯尼迪和桑代克（R.J.Kennedy，E.M.Thorndike）进行了一个与迈克尔逊-莫雷

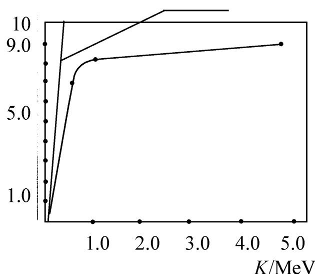
实验相似的实验。区别仅在于:干涉仪两臂长度不等;装置固定于实验室,进行数月之久的长期观测。结果是没有发现与实验室运动的周日变化或季节变化相联系的干涉条纹的移动。由此可得出一个重要结论:在速度有明显不同的两个参照系中,光走完干涉仪上较长臂上的额外距离 $2|l_2-l_1|$ 的时间是相同的。即光在不同的惯性系中的速度相同。真空中的光速与参照系无关,与方向无关,是一普适常数。谈速度而不需要参照系,这在经典力学中是完全不能想像的。阿尔维格尔等的实验进一步证实,光在真空中的速度也与光源本身的运动无关。正是这一系列的实验,为狭义相对论的光速不变原理提供了强有力的支撑。(见“阿尔维格尔–法利–克耶尔曼–沃林实验”、“光速不变原理”)

阿尔维格尔–法利–克耶耳曼–沃林实验 Alvager-Farley-Kjellman-Wallin experiment 检测来自运动光源的光速的现代实验。人们早先认为,如果天空密近双星(相互距离很近,围绕它们共同的质心而运动的两颗恒星)发出的光线速度和光源的运动速度有关的话,那么,这类双星的两颗子星通常具有很大的相对速度,当其中一颗具有一个朝向地球的速度分量时,另一颗子星就会具有背离地球的速度分量。双星的表观运动将会和按引力定律所要求的牛顿轨道存在显著的不同。实际观测中没有发现这种不同,因此相信光速与光源的运动无关。但是后来福克斯(J.G.Fox)论证,这样的双星系统通常为气体云所围绕,地球上观测到来自双星系统的光,实际上是由气体云先吸收、尔后再辐射出来的。穿越空间的光的速率不会受到原始光源运动的影响。1964 年,阿尔维格尔等用地面上的高速运动的光源进行了实验。他们的辐射源由以 99.975% 的光速行进的不稳定粒子(中性 π 介子)组成。实验测得的沿运动方向发射的光子速度为 $(2.9977\pm0.0004)\times10^8\text{m/s}$。这个结果同静止辐射源测得的最佳 c 值极其一致。这个实验令人信服地证明了真空中的光速与光源的运动无关,强有力地支持光速不变原理。(见“光速不变原理”)

极限信号速度 limiting signal velocity 物体传递信号所能达到的最大速度。在经典力学中,物体间的相互作用是超距发生的,是瞬时传播的,也就是说相互作用的传播速度是无限的。相对论改变了这种观念。实验证明,瞬时传播的相互作用在自然界中是不存在的,相互作用的传播速度是有限的。通常把从一个物体向另一个物体传播的相互作用称作“信号”,而把相互作用的传播速度称作“信号速度”。因此,极限信号速度就是相互作用的最大传播速度。从相对性原理可以推断,极限信号速度在一切惯性系中都是一样的,是个普适常数,它就是真空中的光速 c。极限信号速度的存在,也就意味着物体的运动速度存在极限。物体运动的速度不可能大于这个速度。否则,人们就能利用这样的物体,以超过极限信号速度的速度传递信号。(见“极限速率实验”、“类空间隔”、“时钟同步”)

极限速率实验 the ultimate speed experiment 贝托齐(W.Bertozzi)等完成的一个已拍成影片的证明粒子运动存在极限速率的实验。该实验探究了动能直到 15MeV 的电子的速率和动能间的关系。实验装置示意图如下页图所示。用范德格拉夫起电机(Van de Graaff generator)作为直线加速器的注射器,电子在进入直线加速器时,可获得直至 1.5MeV 的能量。然后,电子进入加速器的真正加速部分,并在飞行路径 AB 上计量通过所需的时间。通过直线加速器的射频系统,电子能够获得高达 15MeV 的能量,距离 $AB=8.4\text{m}$,它除以通过所需时间就测得电子的速率。由于仅仅开动了直线加速器的第一段,电子只获得 4.5MeV 的能量。即便如此,也足以清楚地显示,这时电子通过 AB 距离时的速率几乎恒定不变。实验结果用电子速率的平方 v^2 与其动能 K 之间的关系表示在图中。可以清楚地看到,在电子速率与光速 c 可以比拟时,两者的关系显著背离牛顿力学的 $v^2=2K/m$的线性关系,电子速率渐近地趋近光速 $c=3\times10^8\text{m/s}$。在经典力学中,如果一个大小等于地球表面重力的恒力持续地作用在一个物体上,则物体的加速度永远等于 9.8m/s^2。如物体由静止开始加速,





极限速率实验的装置及实验结果图

那么一年以后它的速率就将达到真空中的光速,两年以后它的速率就达光速的两倍。物体运动速率存在极限,这是与牛顿力学不相容的。但这却是狭义相对论中相对论性力学自然的结论。

狭义相对性原理 principle of special relativity 爱因斯坦狭义相对论的两个基本原理之一。所谓相对性原理可以陈述为:一切物理定律在所有惯性系中都是相同的。换句话说,表示物理定律的各种方程对于由一个惯性系到另一个惯性系的时间与空间的各种变换来说是不变的。这就是说,描述物理定律的方程,如用不同惯性系的坐标与时间写出来,将有同样的形式。把相对性原理同物体相互作用传播速度的有限性联合起来,就是爱因斯坦于1905年提出的狭义相对性原理,其确切的含义是,物理定律在任意两个惯性参考系的洛伦兹变换下保持不变。很明显,这和伽利略的相对性原理不同。后者是牛顿经典力学满足的一个相对性原理,是以物体相互作用的传播速度是无限大为出发点的,力学定律是在不同惯性系之间的伽利略变换下保持不变。(见"洛伦兹变换"、"伽利略变换")

光速不变原理 principle of invariance of light speed 爱因斯坦狭义相对论的两个基本原理之一。它可以陈述为:真空中的光速是个普适常数 c,与传播方向、光源的性质和运动无关。这和经典力学的概念根本不同。这里的光速可以完全不问参考系。以此为基本原理和出发点,导出惯性系之间的变换为洛伦兹变换。自洽的结果当然是按洛伦兹变换得出的速度变换公式,真空光速是普适常数。若按伽利略变换导出的速度变换公式,真空光速在不同惯性系中不可能都相同。(见"迈克尔逊-莫雷实验"、"阿尔维格尔-法利-克耶尔曼-沃林实验"、"洛伦兹变换"、"伽利略变换")

事件 event 任一物理现象,总是发生在空间的某一处和时间的某一刻,这种现象称为事件。换言之,任一事件可由三个空间坐标和一个时间坐标描述。如果将时间坐标和空间坐标组合成一个四维时空坐标,那么这种四维时空中的一个点就对应一个事件。

四维时空连续区 4-space-time continuum 如用统一的四维时空坐标来描述一个事件,则所有事件的总体就构成一个四维时空连续区。若将相对论的时空观赋予了它,则在这种连续区上,时间和空间不再是绝对的和互相独立的东西。

间隔 interval 在狭义相对论中,对于两个事件(x_1, y_1, z_1, t_1),(x_2, y_2, z_2, t_2),量

$$\Delta s=[c^2(t_2-t_1)^2-(x_2-x_1)^2-(y_2-y_1)^2-(z_2-z_1)^2]^{1/2}$$

称为该两事件的时空间隔,简称间隔。

对于四维时空中两个无限靠近的事件,则它们的无限小间隔的平方为

$$ds^2=c^2dt^2-dx^2-dy^2-dz^2$$

从光速不变原理出发,间隔在不同惯性系之间变换时将是不变的,即 $\Delta s=\Delta s'$,$ds=ds'$。只有任意两个惯性系之间空-时坐标的洛伦兹变换,才能使间隔保持不变。(见"光速不变原理"、"洛伦兹变换")

类光间隔 lightlike interval 若间隔(见"间隔")$\Delta s^2=0$,$ds^2=0$,即间隔为零,则称为类光间隔,或零间隔(Null interval)。类光间隔的两

事件正好对应光的传播过程。因为当光在 t_1 时刻从(x_1, y_1, z_1)处出发,而在 t_2 时刻到达(x_2, y_2, z_2)处,它传播的空间距离 $\Delta l=[(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2]^{1/2}$,应等于光速 c 和传播时间 $\Delta t=(t_2-t_1)$的乘积 $c(t_2-t_1)$,即

$$c(t_2-t_1)=[(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2]^{1/2}$$

它可以改写成

$$\begin{aligned}\Delta s^2 &= c^2(t_2-t_1)^2-(x_2-x_1)^2\\&\quad-(y_2-y_1)^2-(z_2-z_1)^2\\&=0\end{aligned}$$

所以,类光间隔是描述光的运动的。

类时间隔 timelike interval 若间隔 $\Delta s^2>0$, $ds^2>0$,即间隔为实数,则称为类时间隔。因为类时间隔总可以通过一个坐标变换变到一个参考系中,在那里,两事件发生在同一地点,它们之间的间隔 $\Delta s=c\Delta t$,由纯粹的时间间隔隔开,所以称类时间隔。

类时间隔描述的两事件,不可能通过坐标变换而变成同时发生的事件,更不能使两事件发生时间的“先”、“后”倒转。所以,两个具有因果关系的事件,其间隔必定为类时的。因为粒子运动的速度小于光速,即

$$v^2=\left(\frac{dx}{dt}\right)^2+\left(\frac{dy}{dt}\right)^2+\left(\frac{dz}{dt}\right)^2<c^2,$$

也就是

$$\Delta s^2=c^2dt^2-(dx^2+dy^2+dz^2)>0。$$

所以,粒子运动的世界线上两事件之间的间隔必定为类时间隔。(见“间隔”、“因果性”、“世界线”)

类空间隔 spacelike interval 若间隔 $\Delta s^2<0$, $ds^2<0$,即间隔为虚数,则称为类空间隔。因为类空间隔总能通过坐标变换变到某一参考系中,在那里,两事件发生在同一时间,它们之间的间隔 $\Delta s=\Delta x$,由纯粹空间间隔隔开,所以称为类空间隔。

具有类空间隔的两事件,不可能通过坐标系的变换变为同一地点发生的事件,它们是绝对远离事件。这两个事件要联系,就必须具有超光速的信号速度。这就必然导致破坏因果性观念。设若事件 $P(x, t)$可以通过 $u>c$ 的信号作媒介引起 $Q(x+\Delta x, t+\Delta t)$,那么在另一个以速度 v 运动的参考系看来,事件之间的时间间隔为

$$\begin{aligned}\Delta t' &=(\Delta t-v\Delta x/c^2)/(1-v^2/c^2)^{1/2}\\&=\Delta t(1-uv/c^2)/\sqrt{1-v^2/c^2}\end{aligned}$$

如果 $u>c$,我们定能找到使 $\Delta t'$ 和 Δt 的符号相反的速度 $v(<c)$的值域

$$v>c^2/u,且有\ v<c。$$

这样,在那个参考系观察时,$\Delta t'<0$,从而事件 Q 引起事件 P。因果性被破坏了,物理定律将因观察者的不同而各异。(见“间隔”、“因果性”、“洛伦兹变换”)

线元 line element 三维空间中无限靠近的两点,它们之间的距离称为三维空间中的线元。其平方为

$$ds^2=dx^2+dy^2+dz^2$$

如果我们将四维时空连续区视为一个四维空间,并将它的四个坐标(t, x, y, z)改取为(x_0, x_1, x_2, x_3),其中 $x_0=ict$, $x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$,则这种四维空间的线元与三维空间相似,可定义为无限靠近两点间的距离,即线元的平方为

$$\begin{aligned}ds^2 &=(dx_0)^2+(dx_1)^2+(dx_2)^2+(dx_3)^2\\&=-[c^2dt^2-dx^2-dy^2-dz^2]\end{aligned}$$

可见,这样定义的四维空间的线元,与相应的四维时空连续区的无限小间隔仅差一符号。所以,在注意到定义中的符号后,有的文献中不再严格区分它们。

闵可夫斯基世界 Minkowski world 若用四维空间描述狭义相对论的四维时空连续区,其中三个坐标轴上放置位标:$x^1=x$, $x^2=y$, $x^3=z$,一个坐标轴上放置时标 $x^0=ct$,则其无限小间隔的平方可以写成坐标微分的二次齐式

$$ds^2=\eta_{ik}dx^idx^k,\ i, k=0,1,2,3$$

其中 η_{ik}称为闵可夫斯基度规,其值为

$$\eta_{ik}=\begin{cases}1, & i=k=0\\-1, & i=k=1,2,3\\0, & i\neq k\end{cases}$$

闵可夫斯基把这四维空间称作世界,故称为闵可夫斯基世界。其中每一点(x^0, x^1, x^2, x^3)代表时刻 t 发生在(x^1, x^2, x^3)处的一个事件,称

为世界点；每一条曲线代表事件的进程，比如质点的运动，称为世界线。

闵可夫斯基度规 Minkowski metric 闵可夫斯基世界中的量 η_{ik}称为闵可夫斯基度规。它是一个二阶张量，它的所有元素组成如下矩阵

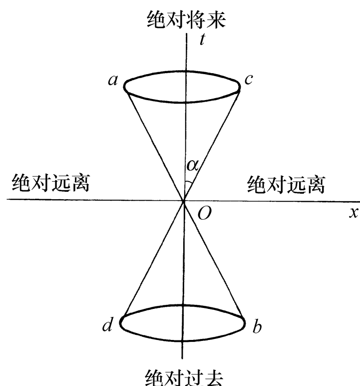
$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

称为闵可夫斯基度规的伽利略值。因为这个值与所取的坐标系有关，它的伽利略值是在空间坐标取直角坐标系时所具有的。如果取其他的空间坐标系（比如球坐标）时，它的值就与伽利略值有所不同，有些元素就可能是坐标的函数。从闵可夫斯基度规计算出这个四维空间的曲率张量为零，因此称这种四维空间是平坦的。（见“闵可夫斯基世界”、“黎曼-克里斯托菲曲率张量”）

世界点 world-point 闵可夫斯基世界中的一点，代表在时间 t，空间（x^1，x^2，x^3）处发生的一个事件。这样的点称为世界点。（见“闵可夫斯基世界”）

世界线 world-line 闵可夫斯基世界中的一条曲线，代表着事件的进程，比如质点的运动，因为它上面的每一点对应着质点每个时刻所在的位置。这种曲线称为世界线（见“闵可夫斯基世界”）

光锥 light cone 从一个世界点出发以及到达这个世界点的所有光的传播的世界线，在四维空间中组成一个三维曲面。在简化的二维（x，t）图上（如图所示），将该世界点放在原点 O。通过 O 点的光的世界线，是交于 O 点的两条直线 ab，cd。光速 c 就是夹角 α 的正切。因为粒子的速度 v 不能超过光速 c，故一切通过 O 点的粒子的世界线必为位于 aoc 和 bod 的锥形区域之内。这种锥形区域称为光锥。包含正时轴（$t>0$）的 aoc 称未来光锥，包含负时轴（$t<0$）的 bod 称为过去光锥。在光锥内部，任一事件与 O 点的事件间的间隔必定是类时的，因为 $c^2t^2-x^2>0$。在 aoc 内，$t>0$，一切事件发生在 O 事件之后，并与参考系无关，是绝对未来的，称未来光锥；在 bod 内，$t<0$，一切事件发生在 O 事件之前，并与参考系无关，是绝对过去的，称过去光锥。在光锥外部，任一事件与 O 事件的间隔是类空的，因为 $c^2t^2-x^2<0$。该区域的一切事件在任何参考系中都发生在空间不同于 O 的点上，对 O 来说，它们是绝对远离的。



光锥图

原时 proper time 固联于运动物体上的参考系携带的时钟，所测得的时间，称为原时，亦称固有时。

有时，固联于物体上的参考系称作该物体的静止系（rest frame）。

原时间隔 proper time interval 若在某惯性系 S 中，两个事件的空间与时间坐标分别为（x_1，y_1，z_1，t_1）、（x_2，y_2，z_2，t_2），则原时间隔 $\Delta\tau$ 定义为 $\Delta\tau=\Delta s/c$。

原时的平方为

$$\Delta\tau^2=(t_2-t_1)^2-[(x_2-x_1)^2+(y_2-y_1)^2+(z_2-z_1)^2]/c^2$$

如果两个事件发生在参考系 S 中的同一地点，则有 $\Delta\tau^2=(t_2-t_1)^2$。可见，原时间隔就是静止在参考系 S 中的时钟所记录的时间间隔。

相对惯性系 S 作任意运动的物体，在其运动的不同瞬间，可视为匀速的，可以引用与物体固连在一起的一个瞬时惯性参考系 S'。在 S 系中，物体在无限小时间间隔 dt 中，发生无限小位移$(dx^2+dy^2+dz^2)^{1/2}$，相应的无限小原时间隔的平方为

$$d\tau^2 = dt^2 - (dx^2 - dy^2 - dz^2)/c^2$$

若 S' 系中观察时，物体的位置并未移动，故有 $d\tau^2 = dt'^2$。可见，原时间隔 $d\tau$ 也就是与物体一起运动的时钟所记录的时间间隔，也称该物体的固有时间间隔。原时间隔是洛伦兹变换下的不变量。

坐标时间 coordinate time　狭义相对论中，在某个选定的参考系中，固定于这个参考系中的时钟所测得的时间，称为坐标时间，两个事件发生的坐标时间之差，称为坐标时间间隔，通常记作 dt。它与原时间隔 $d\tau$ 的关系是

$$d\tau = dt(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$

坐标时间间隔不是洛伦兹变换下的不变量。

洛伦兹变换 Lorentz transformation　狭义相对论中联系任意两个惯性参考系的空间坐标和时间的变换。光速不变原理，即真空光速在不同的惯性系中都相同，将导致两个事件的间隔(见"间隔")在所有的惯性系中都是一样的结论。换句话说，两个事件的间隔，在由一个惯性系到另一个惯性系的坐标与时间的变换下是不变的。伽利略变换不满足这一要求。满足这一要求的变换是洛伦兹变换。

设惯性系 S 和 S' 的坐标轴互相平行，在 $t = t' = 0$ 时它们的原点重合。S' 系以匀速率 v 相对于 S 系沿 x 轴的正向运动。(x, y, z, t) 和 (x', y', z', t') 是同一事件分别按 S 和 S' 系中的规定测量所得的坐标和时间，它们之间的洛伦兹变换就是：

$$x' = (x - vt)/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$
$$y' = y$$
$$z' = z$$
$$t' = (t - vx/c^2)/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$

或

$$x = (x' + vt')/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$
$$y = y'$$
$$z = z'$$
$$t = (t' + vx'/c^2)/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$

这个变换确切地说，应该称洛伦兹-爱因斯坦变换。它先由洛伦兹于 1904 年引入，后由爱因斯坦于 1905 年独立给出。但是，洛伦兹与爱因斯坦不同，他不是作为新理论体系有机的组成部分给出的，他是用这组方程当作修正电磁理论的基础，以使迈克尔逊-莫雷实验的零结果同以光以太提供的独一无二的惯性系的存在相符合。由此变换得出物体在运动方向的尺度要收缩一个因子 $(1 - v^2/c^2)^{1/2}$。这也能导出迈克尔逊-莫雷实验的零结果。但是，洛伦兹的办法显然不能解释肯尼迪-桑代克实验，因为那里干涉仪的两臂不相等，光程差若与 v 有关，在速率 v 改变时，一定会有条纹移动发生。(见"迈克尔逊-莫雷实验")

洛伦兹变换是狭义相对论时空观的数学体现，是许多问题讨论的基础，可导出时间膨胀效应和洛伦兹收缩效应，以及爱因斯坦速度合成原理等狭义相对论的基本结论。

爱因斯坦速度合成定律 Einstein law of composition of velocity　相对论中的物体运动速度合成法则，也就是相对论的速度变换关系，属于相对论性运动学的公式体系。

两个以恒速 v 作相对运动的惯性系 S 和 S'，其惟一确定的方向就只有相对运动的方向，它是一个对称轴。通常将它取为 x-轴的方向，这并不失去一般性。S' 系以速度 v 沿 x-轴相对 S 系运动，$t = t' = 0$ 时两者原点重合，坐标轴方向平行。由洛伦兹变换公式的微商，可导出相对论的速度变换公式

$$u_x = \frac{u_x' + v}{1 + vu_x'/c^2}$$
$$u_y = \frac{u_y'/\gamma}{1 + vu_x'/c^2}$$
$$u_z = \frac{u_z'/\gamma}{1 + vu_x'/c^2}$$

或

$$u_x' = \frac{u_x - v}{1 - vu_x/c^2}$$
$$u_y' = \frac{u_y/\gamma}{1 - vu_x/c^2}$$
$$u_z' = \frac{u_z/\gamma}{1 - vu_x/c^2}$$

其中

$$\gamma = 1/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$

如果物体相对于惯性系 S' 的运动仅发生在 x-轴方向，即 $u_y' = u_z' = 0$，则可得相对论中爱因斯坦速度合成定律

$$u = \frac{u' + v}{1 + u'v/c^2}$$

或

$$u' = \frac{u - v}{1 - uv/c^2}$$

如果将速度合成定律应用于光的传播，当 $u' = c$ 时

$$u = (c + v)/(1 + v/c) = c$$

可见，在惯性系 S 和 S' 中，真空光速都是 c。

这些关系明显不同于伽利略速度变换和速度合成定律。那里是

$$u = u' + v$$

应用于光的传播，$u' = c$，则有

$$u = c + v$$

洛伦兹不变式 Lorentz invariant 表达物理定律的方程，在洛伦兹变换下保持不变（即方程中的各项都是不变量）的，称为洛伦兹不变式。

时钟同步 synchronization of clocks 为要描述物体的运动，我们就要建立发生在不同地点事件之间的时间关系。不同地点的时间是由不同地点的时钟进行测量的。这样，如果不解决不同地点时钟的同步问题，观测就毫无意义。狭义相对论中的异地同时的定义是：位于不同地点 A 和 B 的观测站，A 处的时钟只能记录该处发生的两事件之时间差，B 处时钟也一样。它们分别为“A 时间”和“B 时间”。规定光信号从 A 到 B 所需时间和光信号从 B 到 A 所需时间相同。如果光信号在 $t=0$ 时从 A 出发，到达 B 后返回 A 的时间是 t_0，那么信号到达 B 的时间就定义为 $t_0/2$。根据这个定义，我们就可校准不同地点的时钟，使它们同步。这个定义的推论相当于又定义了光在真空中的速率在任何情况下都具有相同数值。

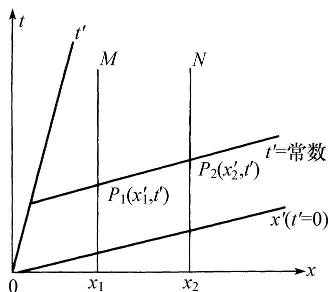
为什么要把同时性的定义建立在速度 c 的基础上，而不把它建立在其他信号速度的基础上呢？因为 c 显然是惟一的，它不仅代表光速，也是整个动力学的极限速率。从长远的观点来看，这一选择导致如下结果：每一已知的物理定律，在所有的参照系中具有相同的形式。

同时的相对性 relative character of simultaneity 在经典力学的绝对时空观中，联系任意两个惯性系之间的坐标变换是伽利略变换，$t' = t$，$\Delta t' = \Delta t$，时间间隔是个不变量，因此在某个惯性系 S 中同时发生的事件，在另一惯性系 S' 中也必定同时发生，同时是绝对的。在狭义相对论中，联系任意两个惯性系的坐标变换是洛伦兹变换。设在 S 系中发生的两个事件：(x_1, t_1)，(x_2, t_2)，它们在 S' 系中对应的事件是 (x_1', t_1')，(x_2', t_2')，按洛伦兹变换，则有

$$\begin{aligned}\Delta t' &= (t_2' - t_1') \\ &= (\Delta t - v\Delta x/c^2)/(1 - v^2/c^2)^{1/2}\end{aligned}$$

其中，$\Delta t = t_2 - t_1$，$\Delta x = x_2 - x_1$。因此，时间间隔不是一个不变量，在 S 系中同时发生的事件（$\Delta t = 0$），在 S' 系中则并不同时。因此，同时是相对的，与参考系的运动有关。

洛伦兹收缩 Lorentz contraction 一根刚尺（即不存在物理上的长度改变），在它是以速度 v（方向与刚尺长度的方向平行）运动的惯性系内测得的长度，比在它是静止其中的惯性系内测得的长度要短，这一现象称为洛伦兹收缩。在某一惯性系中对某一刚尺的长度进行测量，其真实含义就是：以该参考系同时性定义的同一时刻，测量刚尺两端的坐标。如果惯性系 S 中有一根与 x 轴平行的静止刚尺，其两个端点在时刻 $t=0$ 时的坐标分别为 x_1 和 x_2，用 t—x 二维时空图就可描述其运动（如图）。因为



洛伦兹收缩示意图

其相对于 S 始终静止，所以刚尺左、右两端的世界线就是与 t 轴平行的两直线 x_1M 和 x_2N，在以后的任何时刻 t，刚尺两端的坐标之差，也即刚尺的长度，始终都是 $\Delta x = x_2 - x_1$。当在惯性系 S' 中观察时，因为 S' 系以恒速 v 相对于 S 系沿 x 轴正向运动，所以惯性系 S' 的 t' 轴

(即方程 $x'=0$)应是 $o't'$ 的倾斜线,而 x' 轴也是一条倾斜线 $o'x'$。与 x' 轴平行的斜线则为一切在 S' 系中同时($t'=$ 常数)事件的连线。$t'=$ 常数的斜线与刚尺两端在 S 系中世界线的交点 $P_1(x_1', t')$,$P_2(x_2', t')$ 之间的距离 $x_2'-x_1'$ 就是从 S' 系中观测得到的刚尺长度 $\Delta x'=x_2'-x_1'$。由洛伦兹变换可知

$$x_2=(x_2'+vt')/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

$$x_1=(x_1'+vt')/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

$$\begin{aligned}\Delta x&=x_2-x_1\\&=(x_2'-x_1')/(1-v^2/c^2)^{1/2}\\&=\Delta x'/(1-v^2/c^2)^{1/2}\end{aligned}$$

即

$$\Delta x'=\Delta x(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

可见,每一刚尺当它相对于观察者为静止时显得最长;相对于观察者运动时,在运动方向缩短了 $(1-v^2/c^2)^{1/2}$ 倍。洛伦兹收缩是洛伦兹变换的运动学效应之一。因为狭义相对论的基本原理,导致时空间隔(见“间隔”)在惯性系之间的时间与坐标变换下保持不变的结论,而满足这样要求的变换只有洛伦兹变换,故洛伦兹收缩是一种狭义相对论的时空特性。

历史上,长期存在对运动物体的洛伦兹收缩效应的错误理解。相对论发表后的 50 年内,许多物理学家一直坚信这一效应是可以被看到或拍摄下来的。直到 1959 年,特雷尔(J. Terrell)证明了“洛伦兹收缩一般不能就此被眼睛看出”才动摇了这种误解。误解的产生与“观察”一词的理解有关,是由于文献中经常将在某惯性系中进行的测量简单的表述成进行“观察”,再把观察简化为“观看”所造成的。

时间膨胀 time dilation 当时钟相对于观察者运动时,其走时率将比相对于观察者为静止的时钟的走时率要慢,这一现象称为时间膨胀。这里比较的实质在于:将单一时钟上的时间流逝与跟它有相对运动的参考系中的测量结果相比。它是狭义相对论时空根本特性之一。设单一时钟静止于参考系 S 中的点 $x=x_0$ 处。考虑该时钟两个不同读数相应的两事件Ⅰ(x_0, t_1)和Ⅱ(x_0, t_2)。现在,在 S' 系中测量该两个事件的空间、时间坐标为(x_1', t_1')和(x_2', t_2')。可见,S 系中单一时钟上记录的时间流逝 $\Delta t=t_2-t_1$,在 S' 系中对应的是由静止在不同位置 x_2'、x_1' 处的两只时钟读数 t_2'、t_1' 的差 $\Delta t'=t_2'-t_1'$。按洛伦兹变换,应有

$$t_1'=(t_1-vx_0/c^2)/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

$$t_2'=(t_2-vx_0/c^2)/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

故 S' 系中相应两事件的时间差为

$$\Delta t'=t_2'-t_1'=(t_2-t_1)/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

即

$$\Delta t'=\Delta t/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

可见,单一时钟的走时间隔 Δt,在与它有相对运动的惯性参考系 S' 中测量时,膨胀了 $1/(1-v^2/c^2)^{1/2}$ 倍。也可以说,单一时钟的走时率,在同与它有相对运动的参考系中测量的结果相比,显得走慢了(经常简单地说成运动时钟走得慢),走慢的因子是 $(1-v^2/c^2)^{1/2}$。时间膨胀是洛伦兹变换的运动学效应之一。因为洛伦兹变换是由狭义相对论的基本原理所确定的,故时间膨胀是一种狭义相对论的时空特性。

对时间膨胀效应的“运动时钟走得慢”的表述,历史上长期存在过错误的理解。原因是对相对论文献中所使用的“观察”一词经常发生误解。“观察”这个词不应当轻率地使用于发生在不同地点的诸事件上。一旦提到“观看”或“看见”这样的字眼,我们必须立即意识到这一定会涉及光的渡越需要有限的时间。如果我们通过一架双筒望远镜真的观看一台运动的时钟,而该时钟是朝向我们运动的话,由于多普勒效应,我们将看到运动的时钟是走快了而不是走慢了。

固有质量 proper mass 又称静止质量。按狭义相对论,物体的质量与其运动状态有关。固有质量是在固联于物体的参考系中所测得的物体之质量,通常将它记作 m_0。当物体相对于某参考系以速度 v 运动时,该参考系所测得的质量称运动质量 m,它与固有质量的关系是

$$m=\frac{m_0}{(1-v^2/c^2)^{1/2}}$$

固有能量 proper energy 又称静止能量。按狭义相对论的质能关系,运动质量 m 所对

应的能量为 $E=mc^2$。与固有质量 m_0 对应的能量称为固有能量 $E_0=m_0c^2$。

固有长度 proper length 又称静长度，它是在固联于物体的参考系中所测得的长度 l_0。在与物体有相对运动的观察者所测得的长度为 l，它们之间的关系是

$$l=l_0(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

其中 v 是运动观察者相对于物体的速度。

质能关系 mass-energy relation 质量与能量之间的等价关系，在牛顿力学中，质量和能量是两个不同的概念，质量守恒定律和能量守恒定律似乎毫不相关。狭义相对论的主要结论之一，是任何形式的能量均具有惯性。质量守恒与能量守恒被统一为一个守恒定律。能量与质量之间的等价关系是

$$E=mc^2=m_0c^2/(1-v^2/c^2)^{1/2}$$

太阳等恒星中进行着的热核反应是这一关系的最好例证。它是原子能应用的重要理论基础。

光爆丛佯谬 light explosion bush paradox 这是包含在光速不变原理中的一个佯谬。它可陈述为：一个光爆丛在 $t=0$ 时从参考系 S 的原点发出，在随后的任意时刻 t，光爆丛将到达以 $r=ct$ 为半径、以参考系 S 的原点 O 为球心的球面上每一点。在以速度 v 相对于 S 系运动的惯性系 S' 中观察同一现象，描述光爆丛的曲面仍为球面，但其球心在系 S' 的原点 O' 处，尽管 S 和 S' 系的原点仅在 $t=t'=O$ 的一刻才是重合的。

这个初看荒谬但其实正确的现象，当然源于光速在 S 和 S' 系中都是 c 这个光速不变原理。光爆丛在 S 系中的球面方程是

$$x^2+y^2+z^2=c^2t^2$$

应用洛伦兹变换，它在 S' 系中相应的方程是

$$(x')^2+(y')^2+(z')^2=c^2(t')^2$$

它就是以半径 $r'=ct'$ 的球面。这个佯谬与同时性的相对性密切相关。在 S 系中所测得的在相同时刻 t 到达的诸点，在 S' 系中测量时，却是在不同时刻到达的，正是由于这一点，使得光爆丛的传播在两个参考系中都能正确地描述为以速率 c 膨胀着的球壳。

时钟佯谬 clock paradox 在理解时间膨胀效应中产生的一种看似荒唐实则正确的佯谬。它断言：如果在某惯性系中某点上有两只全同的时钟，其中一只保持静止，而另一只沿某种路径运动，且最后又返回出发点与第一只会合。第二只时钟与第一只时钟相比，会失去时间，显得走慢了。时钟佯谬还有一个等价的说法，称孪生子佯谬，它断言：一对孪生子，一个留守地球上，另一个作为宇航员遨游太空后返回地球上出发点时，要比他留守地球上的孪生兄弟年青，并且孪生兄弟俩看法相同。这是爱因斯坦在他 1905 年发表的相对论的论文中阐明的结论。这个问题曾经在 1939 年和 1957～1959 年间发生过两次大争论。

有一种意见认为这个结论是错的，其论据是：因为运动是相对的，从第二只时钟来看，第一只时钟是以速度 $-v$ 相对它而运动的。因此结论应该是第一只时钟会失去时间，显得走慢。两个结论相冲突，所以时钟佯谬不是佯谬，而是真的错误。

我们可证明时钟佯谬实质上是正确的结论，而反对意见的论证方法是错误的。

我们采用最简单、最不易引起歧义的返回路径：(1) 航行者 A 开始出发，在一短得可以忽略的时间内达到速度 v；(2) 航行一段时间后，突然将速度方向反过来；(3) 返回出发点停住。如果留守者 B 观测到从 1 到 3 的整个过程的总时间为 T，则往、返两过程所用时间都是 $T/2$。留守者 B 知道存在时间膨胀，他同意旅行者 A 记录的单程时间为 $[T(1-v^2/c^2)^{1/2}]/2$。因此，他对 A 测得的全程时间为 $T(1-v^2/c^2)^{1/2}$ 是认同的。

反对意见的论证方法是错误的。这是因为，A 和 B 两者之间的地位并不对称。在 A 的旅程中，事件 2 是一个决定性事件，运动速度的突然反向清楚无误地表明他已变更了惯性系(当然，A 在出发的一瞬和最后返回出发点停下的一瞬同样有加速度，要改变惯性系)。但是，留守者 B 则根本不存在这类事情。故相反的论证不能成立，反对意见并不正确。

对于这样两只一直显示各自原时的时钟，最后会合时竟会显示不同的读数，还可如下论证它们的不对称性：无限小原时间隔为 $d\tau=$

ds/c。而

$$ds = [c^2dt^2 - dx^2]^{1/2}$$
$$= [c^2dt'^2 - dx'^2]^{1/2}$$

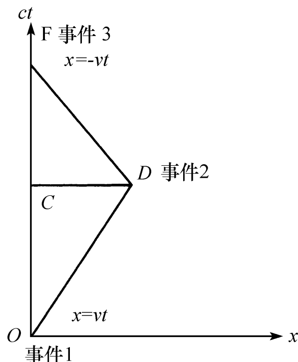
在图中画出了在 B 的静止系 S 中的 A 和 B 二维时-空图，留守者 B 的世界线为沿 ct 轴的直线段 OCF，而旅行者 A 的世界线为折线 ODF。B 的全过程的原时为积分

$$\frac{1}{c}\int_{1(OCF)}^{3} ds = \int_0^T dt = T$$

旅行者 A 全程的原时为沿折线 ODF 的积分

$$\frac{1}{c}\int_{1(OD)}^{2} ds = \int_0^{T/2}(1 - v^2/c^2)^{1/2}dt$$
$$= \frac{1}{2}T(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$
$$\frac{1}{c}\int_{2(DF)}^{3} ds = \int_{T/2}^{T}(1 - v^2/c^2)^{1/2}dt$$
$$= \frac{1}{2}T(1 - v^2/c^2)^{1/2}$$

所以旅行者 A 的全程原时为 $T(1 - v^2/c^2)^{1/2}$。可见，这对孪生兄弟不对称的衰老是实在的。



证明时钟佯谬的时-空图

孪生子佯谬 twin paradox　实际上就是时钟佯谬。（见“时钟佯谬”）

二、广义相对论
General Theory of Relativity

广义相对论 general theory of relativity　相对论性引力理论。该理论由爱因斯坦于 1915 年建立，基本内容载于“广义相对论的基础”一文中。广义相对论的创立，建立在三个前提之上：第一，与欧几里得几何不同的高斯几何和黎曼几何的发展，为爱因斯坦提供了表述其理论体系的数学工具；第二，经典力学和引力理论中惯性质量和引力质量相等的事实成了爱因斯坦提出等效原理的路标，这个原理是广义相对论的物理基石，牛顿力学及其引力理论在天体力学中取得辉煌成功的同时，却不能解释行星近日点的进动，这无疑是发展新的引力理论的一种动力；第三，相对性原理由伽利略相对性原理到狭义相对性原理的发展，为广义相对性原理的提出提供了启示。爱因斯坦用等效原理处理引力的存在对物理定律的效应。从等效原理出发，将狭义相对性原理推广为广义相对性原理，其相应的数学形式为广义协变原理。爱因斯坦利用黎曼几何与张量分析作为其理论体系的数学工具。物质的分布将引起空间的弯曲，使空间不再是平坦的闵可夫斯基世界。这种弯曲空间的度规相当于引力场的“势”，而物质的分布和弯曲空间的度规应满足爱因斯坦的引力场方程。等效原理（或广义协变原理）和引力场方程，构成了广义相对论的基本原理。广义相对论不仅很好地解释了经典引力理论不能解释的行星近日点的进动，而其预言的掠过太阳表面的光线偏折和光谱在引力场中的红移等都为实验所证实。它预言的奇特天体黑洞和引力辐射的探测正成为天体物理学的热门课题。广义相对论也是近代宇宙论的基础。（见“引力质量”、“惯性质量”、“等效原理”、“广义相对性原理”、“广义协变原理”、“黎曼几何”、“度规”、“引力场方程”、“光谱线引力红移”、“光线引力偏折”、“行星近日点进动”、“黑洞”、“引力辐射”等）

引力场 gravitational field　引力是宇宙中所有物质之间普遍存在的一种相互吸引的力。牛顿把引力的作用视作超距作用或传播速度是无限的相互作用。引力的作用规律首先由牛顿万有引力定律确定：任意两个质点之间都存在引力作用，其方向沿两质点间的连线，大小与两质点质量的乘积成正比，与两质点间距离的平方成反比。从场的观点看来，引力场是物质存在的一种形式。宇宙中任何一个物质，

都能在其周围空间引起某种实在的变化或赋予周围空间一种实在的物理属性,使得出现在这个空间中的物体感受到吸引的作用。引力场可由引力势 ϕ 或引力场强度 $\boldsymbol{g}$ 描述。一个质量为 M 的质点在其周围产生引力场,其引力势为

$$\phi=-\frac{GM}{r}$$

其中,G 是引力常数,r 是引力场中一点到引力源 M 的距离。引力场强度 $\boldsymbol{g}$ 定义为引力势的负梯度

$$\boldsymbol{g}=-\mathrm{grad}\,\phi$$

其大小为 GM/r^2。在此场中的任一质量 m,所受的引力为 $m\boldsymbol{g}$。与静电场相似,质量相当于引力荷,引力线的源头是质量,因此,引力场强度 $\boldsymbol{g}$ 同样满足方程

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{g}=4\pi\rho$$

其中 ρ 为质量密度。故一般质量分布所产生的引力势满足泊松方程

$$\Delta_3\phi=-4\pi G\rho$$

其中 Δ_3 为三维拉普拉斯算符。经典引力理论获得过许多重要的成果。但在行星近日点进动等问题上遇到了挑战。爱因斯坦在相对论的基础上发展了相对论性的引力理论——广义相对论。在这个理论中,引力场相应于弯曲时空的度规场,时空度规相当于引力势,时空的仿射联络相当于引力场强度。与经典引力势 ϕ 的泊松方程相对应,广义相对论的引力场方程为

$$G_{ik}=-\frac{8\pi G}{c^4}T_{ik}$$

其中,G_{ik}是爱因斯坦张量,T_{ik}是物质系统的能量——动量张量。爱因斯坦引力场方程把经典引力势的泊松方程作为它在弱场、低速下的极限。引力场的度规按场方程由物质的分布和运动决定,同时场方程也决定物质的分布和运动。物体在引力场中的自由运动,是沿相应引力场弯曲时空的短程线的运动。(见“引力势”、“引力场强度”、“引力势能”、“万有引力定律”、“引力常数”、“度规张量”、“短程线”、“爱因斯坦张量”、“引力场方程”等)

引力势 gravitational potential 经典引力理论中,引力是保守力,可用势函数 ϕ 描述。引力势满足泊松方程。广义相对论中,引力势相当于引力场弯曲空间的仿射联络。(见“引力场”)

引力场强度 gravitational strength 在经典引力理论中,引力场强度 $\boldsymbol{g}$,定义为单位质量的质点在引力场中所受的力。在广义相对论中,引力场强度相当于引力场弯曲空间的仿射联络。见“引力场”。

引力势能 gravitational potential energy 在经典引力理论中,一个物体由于其在引力场中所处位置而具有的能量。如将零引力势能点选择在无限远处,则点质量 M_2 在点质量 M_1 的引力场中,与 M_1 相距 r 时,所具有的引力势能为

$$V=-\frac{GM_1M_2}{r}$$

万有引力定律 law of universal gravitation 牛顿经典引力理论中描述引力的基本定律。它可以陈述为:任意两个质点之间都存在引力,其方向沿两质点间的连线,其大小与两质点质量的乘积成正比,与两质点间的距离平方成反比。即引力的大小可表示为

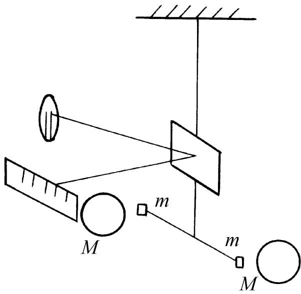
$$F=\frac{Gm_1m_2}{r^2}$$

其中 G 是引力常数,m_1,m_2 是两质点的质量,r 为两质点间距离。

引力常数 gravitational constant 牛顿万有引力定律中的力常数 G(见“万有引力定律”)。测定 G 的实验,是由卡文迪什(H.Cavendish)在1797~1798年进行的扭秤实验。如下页图,他用细棒联结质量为 m 的两个小球,在棒的中点用细线将棒悬挂起来,分别用两个质量为 M 的大球从棒的对侧靠近两个小球,测量棒所产生的偏转。通过测量细棒在扭力作用下的摆动周期,从而计算出引力。

经不断改进,测得的结果是:$G=6.670\times10^{-11}\mathrm{N\cdot m^2/kg^2}$.最佳实验值为 $G=(6.670\pm0.015)\times10^{-11}\mathrm{N\cdot m^2/kg^2}$。

引力质量 gravitational mass 表征物体引力性质大小的物理量。在经典引力理论中,点质量 M 的引力场强度的大小为 $g=GM/r^2$,点



卡文迪什扭秤实验图

质量 m 在此引力场中所受的引力为 mg。这里的 m 起着引力荷的作用,它是表征物体在引力场中感受引力的程度的恒量,故可称为引力质量,并记作 m_g。科学家对引力质量和惯性质量的数值是否相等的问题,进行了长期的研究。在牛顿和 Friedrich Wilhelm Bessel (1784～1846)之后,厄特沃什(Eötvös)于 1889 年用实验证明,不同物质的 m_g/m_i的值的差别小于 10^{-9},所以多数科学家认为物体的引力质量与惯性质量是相等的,$m_g=m_i$。比较新的研究是由普林斯顿的 R.H.Dicke 领导的小组进行的,他们使用改进了的厄缶方法,证明"铝和金朝太阳降落的加速度是相同的,其差值小于 10^{-11}"。(见"惯性质量")

惯性质量 inertial mass 表征物体运动惯性的物理量。经典力学中牛顿第二运动定律说:质点所受的外力 f 与物体获得的加速度成正比,比例常数为 m,即 $f=ma$。物体的 m 是度量物体运动惯性的恒量,称为物体的惯性质量,并记作 m_i,由厄缶实验证明,物体的引力质量与惯性质量是相等的,$m_i=m_g$。(见"引力质量")

等效原理 principle of equivalence 广义相对论的一个基本原理。它可以陈述为:一个作匀加速运动的非惯性参考系,等效于一个均匀引力场。根据物体的惯性质量和引力质量相等的实验事实,在均匀引力场中物体的自由运动与物体的质量无关,都具有相同的加速度。在匀加速参考系中物体的自由运动,也与物体的质量无关,都具有相同的加速度(与参考系的加速度大小相等,方向相反)。非惯性系对物体的惯性力作用,可以看做一个等价场的作用。因此,引力场与非惯性系的等价场相等效,它们可以相抵消。由非惯性系变到惯性系时,这种等价场就会消失。对于不均匀的或与时间有关的任意引力场,如果我们关心的是集中在场的变化很小的时空范围内,那么仍然可以期望引力场和非惯性系的等价场可近似抵消。因此,等效原理的更确切的陈述是:在任意引力场的每一个时空点的充分小的邻域内,有可能选择一个"局部惯性系",使其中自然规律的形式与狭义相对论中的表述形式相同。

上述的等效原理又称强等效原理。如果把其中的"自然规律",限定为"自由降落的质点的运动规律",这样的等效原理称为弱等效原理。弱等效原理只不过是观察到的引力质量与惯性质量相等的复述而已;强等效原理则把这一观察结果推广了,认为它支配了引力对所有物理系统的效应。

等效原理是广义协变原理的物理基础,广义协变原理是等效原理的数学表述。等效原理可用以处理引力对物理规律的影响,利用等效原理,原则上可以得到考虑了引力作用以后的所有物理方程。但在具体操作时,可能是很繁复的。利用广义协变原理,则可以很容易地达到上述目标。

广义坐标变换 general coordinates transformation 对于四维时空坐标($x^0=ct$, x^1, x^2, x^3),一切连续可微的、雅可比行列式不等于零的坐标变换,称为广义坐标变换。

广义相对性原理 principle of general relativity 一切物理定律在所有参考系中具有相同的形式。换言之,不论参考系的运动如何,因此不论它是不是惯性系,在表述物理定律时都是等效的。

广义协变性 general covariance 物理方程在广义坐标变换下,每一项按相同的规则变换,使方程继续成立,则称该方程是广义协变的,相应的物理定律具有广义协变性。

广义协变原理 principle of general covariance 广义相对论基本原理——等效原理的数学表述。它可以陈述为:物理方程在一般的引力场中也成立,只要它满足如下两个条件:第一,

这个方程在引力场不存在时是成立的。即在没有引力场时，它和狭义相对论的定律一致；第二，这个方程是广义协变的，即在一般坐标变换下，它保持自己的形式不变。根据本原理，可以方便地处理引力效应，得到考虑了引力的作用以后物理方程应具有的形式。

黎曼空间 Riemann space 黎曼空间是一种非欧几里得空间，但它依然是一种度量空间，具有不变的线元 $ds^2=\boldsymbol{g}_{ik}dx^i dx^k$，其中，作为广义坐标$(x^0,x^1,\cdots,x^n)$函数的 $\boldsymbol{g}_{ik}$，称为黎曼度规，是个二阶对称张量，故又称度规张量。它决定着黎曼空间的几何性质。黎曼空间的几何称黎曼几何。黎曼空间是弯曲空间，其曲率张量的分量不可能全部都等于零，不可能通过坐标的变换将黎曼空间变为欧几里得空间，即把线元变为

$ds^2=\delta_{ik}dx^i dx^k$，$(\delta_{ik}=1$，当 $i=k$；$\delta_{ik}=0$，当 $i\neq k$，其中 $i,k=0,1,2,\cdots,n)$

广义相对论利用黎曼几何与张量分析作为表述其理论体系的数学工具，认为引力的四维时空是一种特殊的黎曼空间，在其四个坐标中，一个 x^0 取为类时的，三个(x^1,x^2,x^3)取为类空的。其度规 $\boldsymbol{g}_{ik}$应满足条件：$\boldsymbol{g}_{00}>0$，度规张量的分量所组成的矩阵其本征值一定是一个为正数，三个为负数。度规张量 $\boldsymbol{g}_{ik}$由作为引力场源的物质的分布和运动按爱因斯坦引力场方程确定，即由物质决定引力时空的几何性质。引力场视作度规场，引力场的引力势对应时空度规，引力场的强度就对应时空的仿射联络。

黎曼几何 Riemann geometry 黎曼空间的几何学。（见“黎曼空间”）

黎曼度规 Riemann metric 黎曼空间的线元作为坐标微分的二次齐式，其系数 $\boldsymbol{g}_{ik}$决定黎曼空间的几何性质，称黎曼度规。（见“黎曼空间”）

度规张量 metric tensor 黎曼空间的度规 $\boldsymbol{g}_{ik}$是一个二阶协变张量，所以又称度规张量。度规张量一般是坐标的函数。它是一个对称张量，即它的协变指标 i,k 的次序可以交换，$\boldsymbol{g}_{ik}=\boldsymbol{g}_{ki}$，它的协变导数为零，度规张量决定度量空间的几何性质，由它可导出空间的黎曼-克里斯托弗尔曲率张量等。（见“黎曼空间”、“黎曼度规”、“黎曼-克里斯托弗尔曲率张量”）

黎曼-克里斯托弗尔曲率张量 Riemann-Christoffel curvature tensor 又称黎曼张量。它是表征黎曼空间弯曲程度，即曲率的张量。闵可夫斯基世界作为四维时空，其曲率张量为零，故属于没有弯曲的平坦空间。当存在引力场时，空间就是弯曲的，曲率张量不为零，曲率张量与空间的基本张量——度规张量有确定的关系。曲率张量可用仿射联络表示

$$\boldsymbol{R}^i_{klm}=\Gamma^i_{kl,m}-\Gamma^i_{km,l}+\Gamma^i_{nm}\Gamma^n_{kl}-\Gamma^i_{nl}\Gamma^n_{km}$$

而仿射联络可用度规张量表示

$$\Gamma^i_{kl}=\frac{1}{2}\boldsymbol{g}^{im}(\boldsymbol{g}_{mk,l}+\boldsymbol{g}_{ml,k}-\boldsymbol{g}_{kl,m})$$

短程线 geodesic line 又称测地线。它是黎曼空间中两点间具有极值（最短）长度的曲线。平坦的欧几里得空间的短程线是直线，弯曲的黎曼空间的短程线一般不是直线。若以弧长 s 作曲线参数，则短程线方程是

$$\frac{d^2x^i}{ds^2}+\Gamma^i_{kl}\frac{dx^k}{ds}\frac{dx^l}{ds}=0$$

按等效原理，粒子在引力场中的自由运动是沿短程线的运动。由短程线方程可得到粒子的所有运动方程，积分它们就可确定粒子的运动规律。

爱因斯坦张量 Einstein tensor 又称引力张量。它是爱因斯坦在四维弯曲时空中引入的一个二阶对称张量 $\boldsymbol{G}_{ik}$，它定义为

$$\boldsymbol{G}_{ik}=\boldsymbol{R}_{ik}-\boldsymbol{g}_{ik}R/2$$

其中 R_{ik}是 *Ricci* 张量，R 是曲率标量，它们都与弯曲时空的黎曼-克里斯托弗尔曲率张量有关，它们分别定义成

$$\boldsymbol{R}_{ik}=\boldsymbol{g}^{lm}\boldsymbol{R}_{limk}$$

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{R}^i_i=\boldsymbol{g}^{ik}\boldsymbol{R}_{ik}$$

$$\boldsymbol{R}_{limk}=\boldsymbol{g}_{ln}\boldsymbol{R}^n_{imk}$$

其中 $\boldsymbol{R}_{limk}$是由黎曼-克里斯托弗尔曲率张量 $\boldsymbol{R}^n_{imk}$经降标运算而得，称为协变黎曼-克里斯托弗尔曲率张量。

爱因斯坦张量的协变散度为零，即 $\boldsymbol{G}^{ik}_i=0$。它具有十个独立分量。因为它表征了时空的

引力特征,而时空的引力特性决定于物质的分布和运动,所以它和引力场源的能量——动量张量之间存在由爱因斯坦引力场方程确定的关系。(见“黎曼-克里斯托弗尔曲率张量”、“引力场方程”)

引力场方程 equation of gravitational field 广义相对论的基本方程。它是引力时空度规满足的一组偏微分方程。其形式上的推导可有多种方式,但共同的依据是等效原理和广义协变原理。它是如下形式的一个张量方程

$$\boldsymbol{G}_{ik}=-8\pi G\boldsymbol{T}_{ik}/c^4$$

其中,$\boldsymbol{G}_{ik}$是表征引力时空属性的爱因斯坦张量;$\boldsymbol{T}_{ik}$是表征物质分布及其运动特征的能量-动量张量;G 是万有引力常数,c 是真空中的光速。引力场方程揭示了物质分布及其运动与引力时空特性间的制约关系,引力场和物质的运动将同时确定。通常,引力场方程加上物质系统的物态方程,构成一套适定的方程组。施瓦氏的静态球对称引力场度规、克尔的稳定轴对称引力场的度规等都是引力场方程著名的严格解。牛顿经典引力理论中引力势的泊松方程,是引力场方程在非相对论性物质密度 ρ 产生的弱静引力场的极限。(见“引力场”、“施瓦氏度规”、“克尔度规”)

施瓦氏度规 Schwarzschild metric 由施瓦氏(Schwarzschild)于 1916 年得到的真空引力场方程的一个严格解。它是静态、球对称的引力场度规。在施瓦氏坐标中,它可写成

$$\mathrm{d}s^2=\left(1-\frac{2GM}{c^2r}\right)c^2\mathrm{d}t^2-\left(1-\frac{2GM}{c^2r}\right)^{-1}\mathrm{d}r^2-r^2(\mathrm{d}\theta^2+r^2\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2)$$

其中,G 是万有引力常数,M 是场源的质量,c 是真空中的光速。根据 Birkhoff 定理,一切球对称的真空场方程的解都是施瓦氏度规。这个度规可在很好的近似程度上用以描述太阳引力场,解释水星近日点的进动、掠过太阳表面光线的偏折等现象。同时,它也可代表一个老年恒星死亡时经由引力塌缩形成的一个奇特天体-黑洞外部的强引力时空。

施瓦氏半径 Schwarzshild radius 在施瓦氏度规中,在坐标 r 位于 $r_s=\frac{2GM}{C^2}$处,度规具有奇异性。这时度规分量 $g_{00}=0$,$g_{11}\to-\infty$,r_s 称为施瓦氏半径。这里的奇异性是由于坐标系的选择不当而引起的,比如在所谓的克鲁斯卡尔(Kruskal)坐标系中,这里的奇异性便消失了。与 r_s 对应的球面称施瓦氏球面。因为从施瓦氏球面上传出的光线,在远处的观察者看来,将发生无限大的红移,所以又称它为无限红移面。又因施瓦氏球面像单向膜,任何信号只能进入其内部,而不能从它里面传出,所以又称它为视界。在坐标 $r=0$ 处,施瓦氏度规也具奇异性,这时度规分量 $g_{00}\to-\infty$,$g_{11}\to 0$。这里的奇异行为是本性的,不能通过坐标变换去掉。由视界包围奇点 $r=0$,这样的视界内部时空区域,称为施瓦氏黑洞。

克尔度规 Kerr metric 克尔度规是由克尔于 1963 年得到的引力场方程的一个严格解,它是稳定轴对称的。它具有两个参数:质量 M 和与转动角动量 J 有关的参数 a,$J=Mac$。在 Boyer-Lindquist 坐标中,克尔度规的形式是

$$\mathrm{d}s^2=\left(1-\frac{2GMr}{c^2\sum}\right)c^2\mathrm{d}t^2-\frac{\sum}{\Delta}\mathrm{d}r^2-\sum\mathrm{d}\theta^2-\frac{(r^2+a^2)^2-a^2\Delta\sin^2\theta}{c^2\sum}\cdot\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2+\frac{4GMra\sin^2\theta}{c\sum}\mathrm{d}t\mathrm{d}\phi$$

其中 $\sum=r^2+a^2\cos^2\theta$

$$\Delta=r^2-\frac{2GMr}{c^2}+a^2$$

克尔度规具有两个无限红移面,位于坐标 $r_{1,2}=\frac{GM}{c^2}\pm\left(\frac{G^2M^2}{c^4}-a^2\cos^2\theta\right)^{1/2}$处。它的视界也有两个,位于坐标 $r_{\pm}=\frac{GM}{c^2}\pm\left(\frac{G^2M^2}{c^4}-a^2\right)^{1/2}$处。当参数 $a=0$ 时,克尔度规就变为施瓦氏度规,内无限红移面与内视界消失,外无限红移面和外视界外移到施瓦氏半径处。$r=0$ 也是克尔度规的本性奇点,外视界包围这奇点,外视界以内的时空区域称为克尔黑洞。人们普遍相信,任何一个轴对称的电中性的星

体经无限引力塌缩都将形成克尔黑洞。

光谱线引力红移 gravitational red shift of spectral-line 广义相对论的一个重要结论。根据引力时空的基本特性,光在引力场中从引力场强的地方(那里相关的量用下标 0 表之)向引力场弱的地方(该处相关的量用下标 1 表之)传播时,光的频率将会向低频端移动。这个现象称为光谱线的引力红移。引力红移的大小由下式确定

$$\frac{\nu_1}{\nu_0}=\frac{(1-2\phi_0/c^2)^{1/2}}{(1-2\phi_1/c^2)^{1/2}}$$

其中,ϕ 是引力场的经典引力势,

$$\phi=-\frac{GM}{r}$$

以太阳表面的光线传到地球表面上为例。由于太阳表面的 ϕ_0 要比地球表面处的 ϕ_1 大三个数量级。频移的公式可近似化为

$$\frac{(\nu_1-\nu_0)}{\nu_0}=-\frac{GM}{c^2R}$$

将万有引力常数 G,真空光速 c,太阳质量 M 和半径 R 的数据代入后,算出的红移量被实验很好地证实。

光线引力偏折 deflection of light in gravitational field 广义相对论的一个重要结论。根据广义相对论,由于引力场的存在,四维时空不再是平坦的,而是弯曲的。光线在弯曲时空中传播时,不再沿直线行进,而是沿零短程线行进。换言之,光线行至引力场时,将向引力场源一侧偏转。以掠过太阳表面的光的传播为例,如用施瓦氏度规描述太阳引力场的外部时空,则得到的光线路径为

$$\frac{1}{r}=\frac{\cos\phi}{R}+\frac{GM}{c^2R^2}(1+\sin^2\phi)$$

对直线路径的偏转角为

$$\Delta\phi=\frac{4GM}{c^2R}$$

其中 G 是引力常数,M 是太阳质量,R 是太阳半径,c 是光速。将有关数据代入后,理论预言的偏转角是 1.75″。它与实际测得的结果符合得相当好。

行星近日点进动 perihelion precession of planet 行星的绕日轨道并非像经典力学中得出的那样是个严格的闭合椭圆。实际上,行星的轨道存在进动现象。行星近日点的矢径在行星绕日转过一圈后,其方位角并不是增加 2π,而是要稍大一个角度 $\Delta\phi$。所以,行星椭圆轨道的长轴是在轨道平面内旋转的。轨道的进动方向和行星的运动方向相一致。按广义相对论,质点在引力场中的自由运动是沿引力弯曲时空的短程线进行的。如用施瓦氏度规描述太阳的引力场,行星的轨道方程是

$$\frac{d^2u}{d\phi^2}=\frac{1}{p}-u+\alpha u^2$$

其中 $p=\frac{L^2}{GM}$, $\alpha=\frac{3GM}{c^2}$, $u=\frac{1}{r}$。

L 是轨道角动量。如忽略方程中最后一项 αu^2,轨道方程就变为牛顿轨道。考虑了广义相对论的修正后,轨道的近似解为

$$u=\frac{1}{p}(1+e\cos\phi)+\frac{\alpha e}{p^2}\phi\sin\phi$$
$$\cong\frac{1}{p}\left[1+e\cos\left(\phi-\frac{\alpha\phi}{p}\right)\right]$$

所以,每转一圈,近日点矢径比 2π 多转过的角度为

$$\Delta\phi=\frac{2\pi\alpha}{p}=\frac{6\pi GM}{c^2p}\text{弧度/周}$$

这种进动效应虽然很小,但它是累积的。由此可算出每个世纪的这一角度的相应值,对水星是 43.0″,对地球是 3.8″。天文学的观测结果,水星的是 42.6″±0.9″,地球的是 4.6″±2.7″,两者的符合程度相当完美。

雷达回波延迟 delay of radar echo 雷达信号掠过太阳表面传到内行星再反射回地球,由于雷达信号在太阳引力场的弯曲空时中,沿零短程线行进,要比沿直线行进时的路径长一些,其往返时间有延迟。如用施瓦氏度规描述太阳引力场,则广义相对论性的时间延迟

$$\Delta t=\frac{4GM}{c^3}\left(1+\ln\frac{4r_er_p}{R^2}\right)$$

其中,M,R 是太阳的质量和半径,r_e 是日地距离,r_p 是内行星至太阳的距离,G 是引力常数,c 是光速。如果 r_p 用水星的数值代入,则理论上预言的时间延迟是 240μs。1967 年 4 月 28 日到 5 月 20 日,以及同年 8 月 15 日到 9 月 10 日水星两次上合期间,林肯实验室进行的实际

观测结果与理论预言良好地符合。

引力波 gravitational wave　广义相对论的预言之一。在弱场近似下，度规是近闵可夫斯基的，可以写成 $g_{ik}=\eta_{ik}+h_{ik}$，h_{ik}就是对闵可夫斯基度规的小修正。在保留到 h_{ik}的线性项为止，得到线性化的场方程

$$\Box h_{ik}=\eta_{ik}\frac{\partial^2 h_{ik}}{\partial x^i \partial x^k}=-\frac{16\pi G}{c^4}S_{ik}$$

其中 $S_{ik}=T_{ik}-\frac{1}{2}\eta_{ik}T^m_m$。

可见，h_{ik}满足的是波动方程，它的推迟势解为

$$h_{ik}(\boldsymbol{r},t)=\frac{4G}{C^4}\int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \cdot \frac{S(\boldsymbol{r}',t-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/c)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

可见，引力波的传播速度也是光速 c。当 $S_{ik}=0$ 时，这就是普通的齐次波动方程，描述真空中的引力波。

引力波是加速运动的物质发射的，是一种横波。振动源的能量，以波的形式辐射出去，称引力辐射。由于发射引力波的物质运动的动量守恒，引力辐射中不存在偶极辐射，主要是四极辐射，这一点与电磁辐射不同。由于寻常天体的引力辐射功率太小，引力波检测器的灵敏度又很低，因此探测寻常天体的引力辐射难度极大。有希望产生可观察引力辐射的是巨大星体的引力坍缩、超新星爆发等过程形成的中子星或黑洞等。J. 韦伯曾于 1969 年宣布已检测到来自银河系中心的引力辐射，但至今还没有别的科学家用同样的实验检测到这种引力波。1978 年 12 月，J. 泰勒报告了他们在四年间对脉冲星 $PSR1913+16$ 的观察结果，得到的轨道周期的减少率和理论上计算出来的轨道运动因引力辐射损失能量而引起的变化相符合。它被人们认作是引力波探测中令人鼓舞的事件。

引力辐射 gravitational radiation　加速运动的物质系统的能量，以引力波的形式辐射出去，称为引力辐射。见“引力波”。

引力子 graviton　引力子是理论上推测的一种粒子——引力场的量子。按广义相对论，加速的质量或其他的能量分布将发射引力波，正如加速电荷发射电磁波一样。根据量子场论，这样的辐射场应该是量子化的，其能量应以分立的、称为引力子的量子出现，如同光的能量以分立的光子出现一样。引力子的性质是根据引力场方程定出的，其静止质量和电荷均为零，自旋为 2. 因此它是服从玻色-爱因斯坦统计的玻色子。

引力坍缩 gravitational collapse　恒星的平衡构形是靠恒星内部的核反应所产生的辐射压强与恒星的自引力相平衡而达成的。核反应产生的巨大能量，以光和热的形式从星体表面辐射出去。因此，依靠核反应产生的压强维持自引力的情况是不可能永远保持下去的。老年恒星当其核燃料耗尽以后，核反应熄灭，辐射压消失，将导致星体在巨大的自引力作用下的坍缩，称为引力坍缩。在坍缩过程中，如果能存在有别于核反应的新机制，能在星体中形成足以抗衡自引力所需的压强，则星体的引力坍缩过程就可能终止，从而形成新的平衡构形。一种可能的机制是所谓的电子简并压。电子遵从量子力学的泡利不相容原理，不能有两个电子处在完全相同的状态，即使在绝对零度下，除了两个电子处在零能级上之外，其他电子的能量并不为零，这就是所谓的零点能。与零点能相应的压强就是电子简并压。另一种可能的机制是所谓的中子简并压，它产生的原理与电子简并压相似。不过，这两种机制与自引力抗衡形成新的平衡构形是有条件的。由钱德拉西卡的计算得出，如果星体残骸的质量小于太阳质量的 1.3 倍，电子简并压强就能支撑自引力，达成平衡，形成所谓的白矮星。“白”是因为它表面的温度非常高，“矮”是形容它的致密。白矮星是冷星，因为其压强不是来源于核反应，除了不断地冷下来，不会再有进一步的演化。与我们关系密切的太阳，死亡后的结局就是一颗白矮星。如果恒星残骸质量虽比 1.3 倍的太阳质量大，但小于 3.2 倍的太阳质量，则中子简并压可支撑自引力而形成所谓中子星。由于中子星中的物质密度可与原子核中的物质密度相比，所以人们认为中子星是由引力而非核力束缚在一起的核。因我们对如此大密度下物质的行为了解还不够，故中子星的临界质量——3.2 倍的太阳质量，还不

是十分确切。如果恒星残骸质量远比 3.2 倍的太阳质量大，那么，中子简并压也不能抗衡自引力，将发生无限引力坍缩，形成黑洞。（见“黑洞”）

黑洞 black hole 由视界包围一个引力时空本性奇点所构成的时空区域，称为黑洞。静态球对称的星体经无限引力坍缩将形成施瓦氏黑洞，其时空度规为施瓦氏度规。当坍缩星的半径达到施瓦氏半径时，引力场强到一切物质都不能从它那里逃逸出来，连光也不能的程度。因此，外部观察者不可能看到进入施瓦氏半径以后的坍缩过程。从而，在施瓦氏半径处的球面称为视界。视界是个单向膜，信号可以进入，但却不能出来，里面存在一个密度和时空曲率为无限大的奇点。视界即为黑洞的边界。对于稳定轴对称的星体，无限引力坍缩将形成克尔黑洞，其时空度规为克尔度规。由于一切信号不能从黑洞中出来，故黑洞的探测有其难度。但黑洞的强引力场对周围天体必有影响。例如密近双星系统中，若其中一颗是中子星或黑洞，另一颗是普通恒星，则中子星或黑洞的强大引力场将吞噬其身边伴星的物质。中子星因吸进物质而增加质量，当其质量超过其临界质量后，也会形成黑洞。正常伴星的物质被黑洞所吸，在消失在黑洞中之前，螺旋式地绕黑洞旋转，形成所谓的吸积盘。物质在落入黑洞的过程中，由于碰撞、摩擦产生的极高温度，将发出 X 射线来。所以，属于 X 射线源的双星系统，其中那颗非正常恒星的伴星，很有可能会是一个黑洞。目前，多数学者认为，属于闪烁 X 射线源的天鹅 X－1，就是一个黑洞。（见“施瓦氏度规”、“克尔度规”）

能层 ergosphere 在旋转的克尔黑洞中，外视界和外无限红移面之间的区域，称为能层。能层区域具有一个很奇特的性质：其中的某些轨道具有负的总能量，即引力束缚能超过静止质量和动能之和。R.Penrose 提出可以利用这一点，从旋转的黑洞中抽取能量。

宇宙学原理 cosmological principle 大多数宇宙论的一个基本假设。它可以陈述为：宇宙在大尺度上，空间是均匀而且各向同性的。换言之，宇宙中所有的位置本质上是等价的。宇宙的均匀性应同气体的均匀性一样理解，它不适用于宇宙的细节，而只适用于对尺度为 10^8～10^9光年的区域平均的结果，这样的尺度大到足以包括许多星系团。宇宙的各向同性就是指在每个位置的周围显的是球对称的。

罗伯逊－沃克度规 Robertson-Walker metric 依据宇宙学原理，宇宙的时空可用罗伯逊－沃克度规描述。

$$\mathrm{d}s^2 = c^2\mathrm{d}t^2 - R^2(t) \cdot \left[\frac{\mathrm{d}r^2}{1-kr^2} + r^2\mathrm{d}\theta^2 + r^2\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2\right]$$

其中，$R(t)$称为宇宙标度因子，因为它决定着空间的几何标度。

空间的三维标量曲率是 k/R^2。对于 $k=-1$，或 $k=0$，空间是无限的；对于 $k=+1$，空间是有限的（尽管是无界的）。

宇宙半径 radius of universe 对于 $k=+1$，宇宙是封闭的、有限的，宇宙空间可以看成是四维欧几里得空间中半径为 $R(t)$的超球面。因此，罗伯孙－沃克度规中的 $R(t)$可称为宇宙半径。

宇宙学红移 red shift of cosmology 在天文学观察中，发现遥远天体的光谱线存在着系统的红移。大多数天文学家将其解释为遥远的星系在普遍的退行，红移就是宇宙学的多普勒效应。因此称遥远天体光谱线的系统红移为宇宙学红移。

膨胀宇宙 expanding universe 观测遥远天体光谱线的红移，可以得到宇宙标度因子 $R(t)$最重要的信息。若在宇宙的罗伯孙－沃克时空度规中，坐标系(r,θ,ϕ,t)的原点就取在观测者所在处，而被观测的遥远天体位于(r_1,θ_1,ϕ_1)处。考虑该天体以固定的 θ_1 和 ϕ_1，沿 $-r$ 方向从 r_1 向原点 O 传光。设 t_1 时刻发出的光到达原点的时刻为 t_0。光的传播由类光间隔描述，故在罗伯孙－沃克度规（它就是宇宙引力时空中的间隔）中取 $\mathrm{d}s^2=0$，就可得到光的运动规律。由此可得，遥远天体传来的光线，其发射时的频率 ν_1 和观测处测得的频率 ν_0 满足如下关系

$$\frac{\nu_0}{\nu_1} = \frac{R(t_1)}{R(t_0)}$$

由于观测到遥远天体的谱线存在系统红移，即 $\nu_0 < \nu_1$，故 $R(t_0) > R(t_1)$，宇宙标度因子随时间而变大。换言之，我们的宇宙是在膨胀中。红移通常用红移量 z 表示，

$$z = \frac{\lambda_0 - \lambda_1}{\lambda_1} = \frac{\lambda_0}{\lambda_1} - 1 = \frac{v_1}{v_0} - 1$$
$$= R(t_0)/R(t_1) - 1$$

哈勃定律 Hubble law　1929 年，哈勃发现河外星系光谱线的红移与星系的距离成正比。如果用光度距离 d_L 表示星系的距离，它和红移量 z（见“宇宙学红移”）的关系是线性的，

$$cz = H_0 d_L$$

其中，H_0 是哈勃常数，它定义为 $H = (\mathrm{d}R/\mathrm{d}t)/R$，它对应于宇宙今日 t_0 的现在值为

$$H_0 = (\mathrm{d}R(t_0)/\mathrm{d}t)/R(t_0)$$

哈勃常数反映宇宙的膨胀特性，是宇宙的膨胀率，其倒数是宇宙膨胀的特征时间。由于星系距离的定标是一件复杂而困难的事，所以由河外星系红移的测量中得到的 H_0 的数值在不断地变动，比较好的结果是 7.5×10^9 年 $\leqslant H_0^{-1} \leqslant 20\times10^9$ 年。

减速参数 deceleration parameter　膨胀宇宙的无量纲减速参数 q，定义为

$$q = -\frac{R(d^2R/\mathrm{d}t^2)}{(\mathrm{d}R/\mathrm{d}t)^2}$$

与宇宙今日时刻 t_0 对应的就是减速参数的现在值 q_0。

在红移 z—距离 d_L 的关系中，哈勃定律实际上只在较小的 z 值（约小于 0.1）范围内成立。在此范围以外，红移 z 与距离 d_L 的关系，就将偏离线性。若考虑到 z^2 项的贡献，则应是

$$\mathrm{d}_L = H_0^{-1}\left\{ z + \frac{1}{2}(1-q_0)z^2 \right\}$$

由此可见，遥远星系光谱线红移的观测，也可用来测定减速参数 q 的值。虽然 q_0 的测定值也存在不很确定的问题，但它是正数的结论是肯定的，因此宇宙的膨胀在减速。

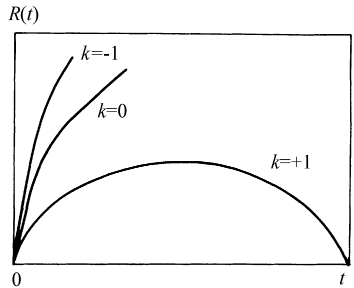
见“宇宙学红移”，“哈勃定律”。

宇宙标准模型 standard model of universe　宇宙标准模型是一种为较多的科学家认同的近代宇宙论。它认为宇宙遵从宇宙学原理，宇宙时空的度规取 Robertson-Walker 形式，宇宙物质内容的能量–动量张量取理想流体的形式

$$\boldsymbol{T}_{ik} = (p + \rho c^2)u_i u_k - p\boldsymbol{g}_{ik}$$

宇宙度规和宇宙能量–动量张量满足爱因斯坦引力场方程。

由引力场方程、能量守恒方程和物态方程组成动力学宇宙论的基本方程。解方程组就可得到宇宙的标度因子 $R(t)$，密度 $\rho(t)$，压强 $p(t)$ 等。按这种方法导出 $R(t)$ 的宇宙模型就称为弗里德曼（Friedmann）模型。对于物质为主时期的宇宙，这样解出的宇宙标度因子 $R(t)$ 如下图所示。



函数 $R(t) - t$ 示意图

宇宙标准模型的主要结论是：宇宙的开端起源于一个无限大密度的奇点，将那一刻取为 $t=0$，则有 $R(0)=0$，这与伽莫夫（G.Gamow）宇宙起源于原始火球的大爆炸理论相符合，宇宙今日时刻 t_0，就是宇宙的年龄。宇宙演化的将来，决定于宇宙曲率 k：对于 $k=1$，宇宙是封闭的，有限但无界的，目前的膨胀终将停止，继之以普遍的收缩；对于 $k=0, -1$，则宇宙是开放的，无限的，目前的膨胀永不会停止。宇宙的曲率又主要依赖于现在的能量密度 ρ_0，如果它大于某个临界密度 ρ_c，即 $\rho_0 > \rho_c$，则曲率为正，宇宙是封闭的；如果 $\rho_0 < \rho_c$，则曲率为负，宇宙是开放的。如果现在宇宙的内容是物质为主，则现在的能量密度 ρ_0 与临界密度 ρ_c 之比为减速参数现在值 q_0 的两倍，即 $\rho_0/\rho_c = 2q_0$，因此宇宙的封闭还是开放又对应着 $q_0 > 1/2$ 或 $q_0 < 1/2$。从星系观察到的宇宙密度的现在值 ρ_0，要比临界值 ρ_c 小两个数量级，宇宙应是开放的；但从宇宙学红移观察得到的减速参数的

现在值 q_0，又大于 1/2，宇宙应是封闭的。这种矛盾的结果，还有待于近代宇宙论和观测天文学两方面的进一步努力去解决。

宇宙年龄 age of universe 放射性纪年用于银河系的研究，得出宇宙的年龄至少是 7×10^9 年。从宇宙学红移的观测得到 H_0、q_0 的值，由弗里德曼解估算出封闭宇宙的年龄约为 7.5×10^9 年。虽然这些数据都带有某些不确定的因素，但从完全不同的途径得出的宇宙年龄在数量级上的符合，至少给我们对这种宇宙演化的图像以信心。目前，估计宇宙的真实年龄在 100 亿～200 亿年之间。

宇宙微波辐射背景 cosmic microwave radiation background 1965 年，Penzias 和 Wilson 发现的微波辐射。因为这种辐射是高度各向同性的，不是来自分立源的，而是充满天空的，故是一种宇宙背景辐射。他们是在 7.35 厘米处接收到的，如果和黑体辐射谱比拟，则其等效温度约为绝对温度 2.7 度。后来在不同波长处所进行的一系列辐射能流测量，证实这种背景辐射符合黑体辐射谱。由于这种微波辐射背景与理论上预言的宇宙早期演化历史将会遗留的辐射背景相吻合，因此多数学者相信它就是物质与辐射处于平衡下的宇宙早期的遗迹，这也是对宇宙标准模型的比较有力的支持。

量子引力理论 quantum theory of gravitational field 广义相对论存在奇性，具有时空曲率为无限大的奇点。这种奇点，不仅反映为令人不解的时空无限弯曲，而且也将破坏因果性。许多学者认为，广义相对论的这一困难，与经典电磁理论中原子的不稳定性的困难相似，是由于广义相对论中的引力场是没有量子化的经典场而产生的，将引力场量子化，有可能克服这一困难。同时，引力波的存在已为多数学者所相信，故不可量子化的引力场是不能想像的。量子引力理论的研究已取得一定进展。但是引力场的量子化遇到了一个严重困难，圈图发散，不可重整化。近来，许多人相信，广义相对论是一种规范场论，由此发展了超引力理论。已经证明，量子化后的超引力理论，双圈以内的发散都可互相抵消。不过，不可重整化的困难能否最终解决，还需继续研究。

Astrophysics
天体物理学

天体物理学 astrophysics　天文学的一个主要分支,也是物理学的分支之一,是利用物理学的技术、方法和理论来研究天体的形态、结构、物理条件、化学组成和演化规律的学科。天体上发现的某些奇特现象也能启发和推动现代物理学的发展,一些天体所具有的极端条件和宇宙环境为物理学提供了极好的天然实验室。

古代天文学家测量太阳、月亮、星星在天空的位置,研究它们的位置随时间的变化规律,为农、牧业的需要确定了时间、季节和历法,创建了天体测量学。17 世纪,牛顿把力学概念应用于行星运动的研究,发现和验证了万有引力定律,并创立了天体力学,使天文学从单纯研究天体运动的状态,到研究天体运动的原因。天体之间的引力作用虽然说明了许多天文现象,却不足以阐明天体的本质。19 世纪中叶以来,物理学的重大发展把天文学推进到一个新的阶段,天体物理学的诞生标志着现代天文学的起点。19 世纪末到 20 世纪初,量子论、相对论、原子核物理学和高能物理学的创立,又给天文学以新的理论工具,使人们有可能对天体的化学组成、物理性质、运动状态和演化规律作深入的了解和本质的认识。1859 年,基尔霍夫(Kirchhoff)对太阳光谱的吸收线作出了科学解释,推动了天文学家用分光镜研究恒星。1864 年,哈根斯(Huggins)用高色散度的色谱仪观测恒星,证认出某些元素的谱线,又测定了一些恒星的视向速度。1885 年,皮克林(Pickering,E.C)首先使用物端棱镜拍摄光谱,进行光谱分类。1905 年,赫茨普龙(Hertzsprung)在观测基础上将部分恒星分为巨星和矮星。1913 年,罗素(Russell,H.N.)按绝对星等和光谱型绘制恒星分布图,即赫罗图。在理论方面,1920 年,萨哈(Saha)提出恒星大气电离理论,通过埃姆登(Emden)、施瓦氏(Schwarzschild,K.)、爱丁顿(Eddington)等人的研究,关于恒星内部结构的理论逐渐成熟。1938 年,贝特(Bethe)提出了氢聚变为氦的热核反应理论,成功地解决了主序星的产能机制问题。1929 年,哈勃(Hubble)在研究河外星系光谱时,提出了哈勃定律,极大地推动了星系天文学的发展。1931~1932 年,央斯基(Jansky)发现了来自银河系中心方向的宇宙无线电波。40 年代,英国军用雷达发现了太阳的无线电辐射,从此,射电天文蓬勃发展起来。60 年代,主要靠射电手段发现了类星体、脉冲星、星际分子和微波背景辐射。1946 年,美国开始用火箭在离地面 20~100 公里高度处拍摄紫外光谱。1957 年,前苏联发射人造地球卫星,为大气外层空间观测创造了条件,使探测天体的紫外线、X 射线、γ 射线等波段的辐射成为可能,从此天文学进入全波段观测时代。

天体物理学分为:太阳物理学、太阳系物理学、恒星物理学、恒星天文学、星系天文学、宇宙学、宇宙化学、天体演化学等分支学科。另外,射电天文学、空间天文学、高能天体物理学也是它的分支。

太阳物理学研究太阳的表面特征、内部结构、能量来源、化学组成以及各种活动现象。太阳系物理学研究行星、彗星等太阳系天体,随着空间探测的进展,太阳系研究成为最活跃的领域之一。恒星物理学研究各类恒星的物理状态、化学组成、结构和演化。恒星天文学主要依靠统计分析方法研究恒星、星际物质和各种恒星集团的分布和运动特性。星系天文学以星系、星系际空间和星系集团为研究对象。宇宙学从整体上研究宇宙的结构和演化。宇宙化学通过陨石、月球岩石样品、宇宙尘、宇宙射线等的直接取样或天体的辐射,确定宇宙物质的元素、同位素、分子和矿物组成及其含量,并研究宇宙物质的化学演化规律。天体演化学则研究各类天体和天体系统的起源和演化,即研究它们的产生、发展和衰亡的历史。

用物理学的技术和方法分析来自天体的电磁辐射,可得到天体的物理参数,根据这些参

数，应用物理理论来阐明发生在天体上的物理过程及其演变，这是实测天体物理学和理论天体物理学的任务。除了宇宙线的粒子探测、陨石的实验室分析、宇宙飞行器对太阳系天体的实地采样和分析，以及尚在努力探索中的中微子、引力波观测之外，目前关于天体的信息都来自电磁辐射。天体物理仪器的作用是对电磁辐射的收集、定位、变换和分析处理。电磁辐射的收集和定位是由望远镜(包括射电望远镜)来实现的。为了获得更多物理信息，必须对电磁辐射进行频谱分析。最简单的探测器——人眼不免有主观成分，照相底片引入后，才有了客观的探测器；光电倍增管的应用弥补了底片的非线性响应的缺陷。固体器件兼有照相底片和光电倍增管的长处。从辐射的连续谱可以判断辐射机制，还可以得到天体的表面温度。从早型星的巴耳末(Balmer)系限的跳变，可以得知天体的表面压力。从线谱可以得到更多的信息：视向速度、电子温度、电子密度、化学组成、激发温度、湍流温度。对双星的观测研究可以得到天体的半径、质量和光度等重要数据。研究脉动变星的光变周期和光度之间的关系(周光关系)，可以确定天体的距离。理论天体物理学是解释已知天文现象的有力工具，而且还可以预测尚未观测到的天体和天象。以辐射转移理论为基础建立的恒星大气理论、以热核聚变概念为基础发展起来的元素合成理论、恒星内部结构理论和天体演化理论，乃是天体物理学的基础。理论物理学中的辐射、原子核、引力、等离子体、固体和基本粒子等理论，为研究类星体、宇宙线、黑洞、脉冲星、星际尘埃、超新星爆发奠定了基础。

阿波罗月球探测 Apollo lunar exploration 美国国家航空和航天局1972年底以前完成的规模最大的月球探测计划。阿波罗飞船的任务包括为载人登月飞行作准备和实现载人登月飞行，共发射17次。1969年7月20日，阿波罗11号登月舱第一次实现了人类登月的创举。阿波罗月球探测获得了大量有意义的资料，详细揭示了月球表面结构特征、月球物质的化学组成、光学和热力学特性，并探测了月球的重力、磁场和月震等。

阿尔文波 Alfvén wave 1970年诺贝尔奖金获得者瑞典科学家阿尔文发现的一种磁流力学波。处在磁场中的等离子体，由于密度扰动和磁场变化之间的相互作用，会激发起阿尔文波。假设：磁场 B_0 在 y-z 平面内，磁场变化 B' 的 x 分量 B'_x 满足波动方程

$$\frac{\partial^2 B'_x}{\partial t^2} - v_z^2 \frac{\partial^2 B'_x}{\partial z^2} = 0$$

其中

$$v_z^2 = \frac{B_0^2 \cos^2 \vartheta}{4\pi\rho} = v_A^2 \cos^2 \vartheta$$

速度的 x 分量 v_x 也满足上述波动方程。这就是阿尔文波。如果波沿磁场方向传播，则传播速度为阿尔文速度

$$v_A = B_0 / \sqrt{4\pi\rho}$$

爱丁顿极限 Eddington limit 使天体辐射压力不超过引力的光度上限。英国天体物理学家爱丁顿研究了天体中能量通过辐射传输会产生压力。如果光度太大，辐射压超过引力，天体就不能维持平衡而瓦解。作为临界情况，两者相等，给出一个光度极限

$$L_E = 4\pi c G M / K_s$$

式中 K_s 为汤姆逊和/或康普顿散射不透明度。太阳的爱丁顿极限是 10^{38}erg/s(1erg=10^{-7}J)。

爱因斯坦静态宇宙模型 Einstein static model 爱因斯坦于1916年发表了广义相对论，第二年便应用到宇宙学中，建立了第一个现代宇宙学模型。这是一个有限无边的封闭宇宙、有物质无运动的静态宇宙，度规为

$$ds^2 = \frac{dr^2}{1 - r^2/R^2} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta d\varphi^2) - c^2 dt^2$$

式中 r, θ, ϕ 为球坐标，t 为宇宙时，R 为宇宙半径。为了得到静态宇宙解，爱因斯坦在他的引力场方程中加了一个宇宙常数 Λ 项，$\Lambda = 1/R^2$。

矮星 dwarf 恒星光谱分类中光度级为V的恒星，等同于主序星。光谱型为O、B、A的矮星为蓝矮星(如织女一、天狼)，光谱型为F、G的矮星为黄矮星(如太阳)，光谱型为K及更晚的矮星称为红矮星(如南门二乙星)。

奥伯斯佯谬 Olbers paradox 1823年，德国

天文学家奥伯斯提出了一个早已为人们注意到的问题,即夜天空为什么是黑的?如果宇宙是无限、均匀和静止的,那么无论从哪个方向观看天空,视线总会碰到一个星星,整个天空应该到处都像太阳一样亮。实际上除了点点繁星,夜天空是黑的,这一矛盾就叫做奥伯斯佯谬。即使天体之间有消光物质,这个矛盾也仍然存在。奥伯斯佯谬的解释涉及宇宙的膨胀和年龄。由于宇宙在膨胀,根据多普勒效应和哈勃定律,来自星系及组成星系的恒星的光波长变长,光子能量减少。这些天体离我们越远,光能减少越多。但更重要的原因还在于,由于光速是有限的,当我们观测遥远天体时,我们实际上得到的是它们的历史信息。计算表明,要看到一个均匀、明亮的夜天空,我们的视线必须达到 10^{24}光年,也就是必须追溯到它们 10^{24}年或者更早的历史。然而那时这些天体还没有形成,我们宇宙的年龄也只有 10^{10}年量级。因此,我们不能看到一个均匀、明亮的夜天空。

奥本海默极限 Oppenheimer limit 稳定中子星的质量上限。1939 年奥本海默等首先讨论了由简并中子态物质构成的致密星体,即中子星的平衡和稳定性。这种星体的性质主要由自引力和简并中子压力的平衡决定。利用广义相对论的无转动球对称星体结构方程,并用理想费米气体方程作为中子物质的物态方程,奥本海默等证明,存在一个临界质量 $M_c \approx 0.75\,M_\odot$($M_\odot$表示太阳质量),当星体的质量小于 M_c 时,存在稳定的平衡解;反之,没有稳定的平衡解。中子星的质量上限 M_c 就是奥本海默极限。如果采用更接近实际的中子物态方程,奥本海默极限的数值将不同于原来的数值。由于目前有关密度大于 10^{15}g/cm^3 的物态方程还不确定,中子星的质量上限也不确定,一般可取为 $2\,M_\odot$。

贝克林–诺伊格鲍天体 Becklin-Neugebauer object(BN object) 猎户座的低温天体,以发现者贝克林和诺伊格鲍两人的姓氏命名。它在猎户座四边形聚星之北约 1′处,是著名红外源之一,色温度约 600K,发现于 1996 年。可能是坍缩中的、质量 5～10 $M_\odot$的原恒星。

巴耳末减幅 Balmer decrement 一般说来,巴耳末发射线中 H_α 最强,H_β 次之,越往后强度越小。以 H_β 为单位的各条巴耳末发射线的强度称为巴耳末减幅。巴耳末发射线的强度与天体的物理性质如密度、温度、宏观运动状况等有关,因此,巴耳末减幅为研究天体中的物理条件和物理过程提供了重要线索。

巴耳末系 Balmer Series 位于可见光区,和氢原子第二个能级有关的一个线系。从第三、四、五…能级到第二能级之间的跃迁分别产生 H_α、H_β、H_γ…谱线,它们组成巴耳末系。

巴耳末跳跃 Balmer jump(also called Balmer discontinuity) 氢原子连续谱强度在巴耳末系限(3646Å)的突然下降。这是由于处于第二能级的氢原子吸收能量而被电离。

巴纳德星 Barnard star 1916 年美国天文学家巴纳德在蛇夫座发现一颗每年自行 10″.31 的恒星,星号为 BD+4°3561。它是目前已知的自行最大的恒星。用三角视差法测出它的距离为 5.9 光年,是除太阳和半人马座比邻星外离我们最近的恒星。它的光电目视星等 V 为 9.54,光谱分类为 M5V,是一颗红矮星。1963 年美国天文学家范德坎普(Van de Kamp)发现巴纳德星的运动有周期性的摄动,这种摄动是由看不见的伴星引起的。新的分析认为巴纳德星有两个伴星。

白矮星 white dwarf 一类低光度、高温度、高密度的简并态恒星,是恒星晚期演化的产物。其质量接近于太阳(根据简并气体理论推算出的无自转白矮星质量上限约为 1.44 个太阳质量),半径与地球差不多,密度高达 10^5～10^7g/cm^3,磁场强度 10^5～10^7Gs。按光谱特征分为 DA、DB、DC、DF、DP 等类型,分别代表富氢、富氦、富碳、富钙和强磁场白矮星。典型的白矮星是天狼星的伴星。当恒星经过红巨星阶段并损失质量以后,若剩下的质量小于 1.44 个太阳质量,便演化成白矮星。白矮星常作为一个子星出现在新星和矮新星等的双星中。

白洞 white hole 理论预言的一种天体。与黑洞相反,白洞只能由中心向外发射物质和能量,而不能吸收外部区域的任何物质和辐射。白洞目前只是一种理论模型,尚未被观测所

证实。

棒旋星系 barred spiral galaxy 一种有棒状结构贯穿星系核的旋涡星系。在星系形态的分类中,以符号 SB 表示,以别于正常旋涡星系 S。在全天的亮星系中,棒旋星系约占 15%。当统计到较暗的星系时,棒旋星系的比例数提高到 25%。

爆发变星 eruptive variable star 一种亮度突然激烈增强的变星。光变起因于星周物质、星面附近或恒星内部发生的爆发活动。包括超新星、激变变星(新星、再发新星、矮新星及类新星变星)、猎户座变星(金牛 T 型星、御夫 RW 型星)和耀星(鲸鱼 UV 型星)。

北斗 big dipper 大熊座中排列成斗形的七颗亮星。它们是大熊座 α、β、γ、δ、ε、ζ 和 η,中国名称分别叫做天枢(北斗一)、天璇(北斗二)、天玑(北斗三)、天权(北斗四)、玉衡(北斗五)、开阳(北斗六)和摇光(北斗七)。北斗七星中的前四颗星,即天枢、天璇、天玑和天权组成斗形,故名斗魁或称魁星,又名璇玑。玉衡、开阳、摇光三星组成斗柄(即斗杓)或称玉衡。北斗七星离北天极不远,非常容易识别,常被用来作为指示方向和认识北天其他星座的标志。如果沿天璇至天枢方向延长约五倍,可找到一颗视亮度与它们不相上下的恒星,那就是小熊座 α 星,即北极星。

北极星 pole star 即小熊座 α,中国星名是勾陈一或北辰。北极星距离我们约 400 光年,自行为每年0″.046,距极点不足 1°,因此,对于地球上的观测者来说,它好像不参与周日运动,总是位于北天极处,因而被称为北极星。北极星是由三颗星组成的三合星。由于岁差,天极以约 26 000 年的周期绕黄极运动。在这一期间,一些离北天极较近的亮星——天龙座 α(中名右枢)、小熊座 α、仙王座 γ、仙王座 α(中名天钩五)、天鹅座 α(中名天津四)、天琴座 α(中名织女)依次被授予“北极星”的称号。

本星系群 local group of galaxies 以银河系为中心,半径约为百万秒差距的空间内的星系之总称。已知本星系群的成员星系和可能的成员星系有 40 个左右,除银河系以外,还有仙女星系、三角星系和大小麦哲伦云等。

变星 variable star 亮度起伏变化的恒星。按照光度变化的原因,可以分为脉动变星、爆发变星和几何变星三大类。根据光变的形态和物理原因,又细分为若干次型。变星种类繁多,从超巨星到红矮星都有。主星序前的金牛座 T 型变星、主星序上或主星序附近的脉动变星、主星序后的北冕座 R 型变星,都能为这些演化阶段提供重要信息。变星分属于中介星族Ⅰ、旋臂星族、盘星族、中介星族Ⅱ以及晕星族五种不同空间结构的次系,是研究银河系结构和动力学的重要线索。此外,食变星能提供恒星的质量、大小和光度等基本参量。造父变星的周光关系、新星的极大亮度平均值效应也为量度天体的距离提供了标准。

钱德拉塞卡极限 Chandrasekhar limit 白矮星的质量上限。白矮星是一种靠简并电子压力来抗衡自引力而维持平衡的简并矮星。20 世纪 30 年代,钱德拉塞卡研究了白矮星的平衡和稳定性质,利用牛顿引力理论中的无转动球对称星体结构方程,并用理想费米气体方程作为简并电子的物态方程,证明存在一个质量上限 $M_c \approx 1.44 M_{\odot}$(式中 $M_{\odot}$为太阳质量),当星体的质量小于 M_c 时,存在稳定的平衡解;大于 M_c 时,没有稳定的平衡解。

超巨星 supergiant 光度最强的恒星。它们的绝对目视星等亮于-2 等,在赫罗图上位于最上方,在恒星光谱的 MK 二元分类中用罗马数字Ⅰ表示。由于光谱型相同的恒星其表面温度也相同,超巨星的光度很大,说明其表面积比光谱型相同的非超巨星大。

超新星 supernova 爆发规模超过新星的变星。爆发时光度为 $10^7 \sim 10^{10}$太阳光度(相当于整个星系的光度)。释放能量 $10^{47} \sim 10^{52}$erg,光变幅超过 17 个星等,这是恒星世界中已知的最激烈的爆发现象。爆发结果或是将恒星物质完全抛散,成为星云遗迹,结束恒星的演化史;或是抛射掉大部分质量,遗留下的部分物质坍缩为白矮星、中子星或黑洞,从而进入恒星演化的晚期和终了阶段。超新星爆发后形成强的射电源、X 射线源和宇宙线源。超新星还是星际重元素的主要贡献者。

超星系团 super-cluster 若干星系团聚集在

一起构成的更高一级的天体系统。本星系群同附近的50个左右星系群和星系团构成本超星系团。星系团聚合成超星系团的现象叫作星系的超级成团或二级成团。超星系团的质量范围为10^{15}～10^{17}太阳质量；通常在一个超星系团内只含有2～3个星系团。拥有几十个成员星系团的超星系团是不多的。超星系团往往具有扁长的外形，长径范围为60～100万秒差距，长短径之比约为4∶1；这种扁形结构说明超星系团通常有自转。超星系团内的成员星系团的速度弥散度大约为每秒1000～3000公里，但各成员星系团之间的引力相互作用要比星系团内各成员星系之间的引力作用弱得多，因而有人认为超星系团可能是不稳定的系统。超星系团的存在，表明宇宙空间的物质分布至少在100百万秒差距的尺度上是不均匀的。至于是否所有的星系团都是不同大小的超星系团的成员，由于观测资料的不足和分析方法上的困难，这个问题还远未取得一致意见。

大爆炸宇宙学 big-bang cosmology 现代宇宙学中最有影响的一种学说。认为宇宙曾有一段从热到冷的演化史，在这个时期里，宇宙不断膨胀，物质密度从密到稀。这一从热到冷、从密到稀的过程如同一次规模巨大的爆炸。根据大爆炸宇宙学，在宇宙早期，温度极高，在100亿度以上，物质密度相当大，宇宙间只有中子、质子、电子、光子和中微子等基本粒子形态的物质。随着整个体系的膨胀，温度很快降低，降到10亿度左右时，中子要么衰变，要么与质子结合成重氢、氦等元素。化学元素就是从这一时期开始形成的。温度进一步下降到100万度后，早期形成化学元素的过程结束。宇宙间的物质主要是质子、电子、光子和一些比较轻的原子核。当温度降到几千度时，辐射减退，宇宙间主要是气态物质，并由此形成各种恒星体系，成为我们今天看到的宇宙。大爆炸宇宙学能说明比较多的观测事实，也存在一些未解决的问题。

爱因斯坦-德西特宇宙模型 Einstein-de Sitter model 有限密度、零曲率和非零宇宙常数的均匀宇宙模型，是最简单的相对论宇宙模型。它是广义相对论场方程在膨胀欧几里得空间的解。宇宙半径从零开始迅速增加，但增加的速率越来越低。

地球辐射带 radiation belts of the earth 地磁场俘获的带电粒子带。辐射带内的带电粒子是太阳风、宇宙线与地球高层大气相互作用而产生的高能粒子。它们在地磁场的作用下，沿磁力线作螺旋运动并不断发射出电磁波。1905年斯托米（Störmer）根据极光观测曾经预言过它的存在，1958年范艾伦（Van Allen）分析人造地球卫星探测器的资料，于1959年证实它的存在，因而也称为范艾伦带。地球辐射带在地球磁层内，只存在于一定磁纬地区的上空。

地球弓形激波 earth bow shock 由于太阳风以高速度接近地球磁场的边缘，使得在地球周围形成一个无碰撞的弓形激波。太阳风的结构并不稳定，因而弓形激波的结构也不断变化。激波波阵面的顶点、方向以及它与地心的距离均随着太阳风的强弱、太阳风的磁场走向而不同。激波波阵面的顶点与地心距离约为14个地球半径，但若有异常的太阳风，则可能延伸到30个地球半径。

地外文明 extraterrestrial civilization 地球以外的其他天体上可能存在的高级理智生物的文明。如包括人类文明在内，则可称宇宙文明。宇宙间任何天体，只要条件适合，就可能产生原始生命，并逐渐进化到高级生物。有些研究者把文明分为三种类型：Ⅰ型文明是只能控制本星球的文明，利用本星球的矿藏能源，在本星球上种植、生产和居住，人类文明就属于Ⅰ型文明。Ⅱ型文明是能掌握整个恒星和所属行星系统的文明。以地球为例，将来人类能掌握太阳系内任何天体的物质和能源时，就进入了Ⅱ型文明时期。Ⅲ型文明是能掌握整个星系的文明。将来人类能掌握整个银河系的文明时，就进入了很高级的Ⅲ型文明时期。Ⅱ型文明和Ⅲ型文明称为高级文明。科学家估计银河系内具有地外文明的天体数目可达10万个，1960年以来射电天文学家正在努力探测地外文明的信息。

短缺质量 missing mass 星系的位力质量和

光度质量之间的差额,有人称为隐匿质量。分析星系集团成员星系的红移,可得速度弥散度,再根据位力定理算出星系集团的总质量,这就是所谓的位力质量。按照星系的质光比也可以估计星系集团的总质量,这样测定的质量称为光度质量。位力质量一般总是大于光度质量,也就是说根据质光比的计算,质量有些短缺,也叫作质量不相符(mass discrepancy)。一般富星系团的质量不相符因子可能为10左右,后发星系团为3~7,室女星系团约为8。此外,在宇宙学中,根据某些理论,宇宙间的物质密度比观测值大,例如要求宇宙常数 Λ 为零,宇宙的密度就应为现在观测值的40倍,这样就缺少大量的物质,这就是宇宙学中的短缺质量问题。

对日照 counterglow 在天空中正背着太阳的方向看到的形似椭圆的模糊光斑。长轴角直径约为8°~10°,短轴约为5°~6°,是黄道光带中亮度最强的那一部分。

多镜面望远镜 multiple mirror telescope 集合许多块镜面从而获得更大等值口径的望远镜。1971年美国开始研制第一架多镜面望远镜(MMT),它由六个口径各为1.8米的卡塞格林望远镜组成。六个望远镜绕中心轴排成六角形,六束会聚光各经一块平面镜射向一个六面光束合成器,后者把六束光聚在一个共同焦点上,组合后的口径相当于4.5米。

多普勒致宽 Doppler broadening 由原子或原子集团运动的多普勒效应引起的谱线致宽。1842年奥地利物理学家多普勒发现,波源和观测者的相对运动会使观测到的波的频率发生变化,这种现象称为多普勒效应。在视线方向速度为 v 的原子辐射频率的变化 $\Delta\upsilon$ 称为多普勒位移

$$\frac{\Delta\upsilon}{\upsilon_0}=\frac{\Delta\lambda}{\lambda_0}=\frac{v}{c},$$

式中 υ_0、λ_0 为谱线中心频率和波长,c 为光速,$\Delta\upsilon$ 和 $\Delta\lambda$ 为频率和波长的多普勒位移。发射(或吸收)光的原子具有不规则的热运动,其中某些原子向着观测者运动,而另一些原子背着观测者运动,速度大小也各不相同。在这种情况下,原子发射(或吸收)的频率有些紫移,有些红移,移动量也各不相同。总的效果是使原子发射(或吸收)的谱线加宽。

γ射线爆发 γ-ray burst 宇宙中γ射线源的一种短暂的猛烈的爆发。1973年克莱比塞得(Klebesade)和斯特朗(Strong)等根据"维拉"卫星上γ射线探测器的观测资料发现了这一现象,它是20世纪70年代天体物理学的重大发现之一。

非局部热动平衡 non-local thermodynamic equilibrium 恒星大气明显地不处于平衡状态。各类恒星大气偏离热动平衡的程度各不相同。对偏离热动平衡不大的恒星大气,可以引入局部热动平衡的假设来近似地表述它的热状态。但在许多情况下,如太阳色球、日冕、有延伸大气的恒星、行星状星云、星云、星际物质等的物理状态,偏离热动平衡较大,甚至局部热动平衡的假设也不能适用,这种物理状态称为非局部热动平衡(NLTE)。非局部热动平衡的状态下原子的激发、电离、辐射和物质的相互作用等,都不能简单地用一个局部温度来表述。如果所研究的天体是稳定的,表述它的物理量应不随时间变化或只随时间作缓慢的变化。这种情况下,可以应用稳定性条件。处于各种状态(电离级或激发态)的原子数应不随时间变化,据此建立起原子的统计平衡(即粗糙平衡)方程。它表示在单位时间内到达某一状态的原子总数与离开这一状态的原子总数相等。由于原子的统计平衡又和辐射场密切相关,所以在处理非局部热动平衡问题时,必须把辐射转移方程和原子的统计平衡方程组联立起来求解。

分光双星 spectroscopic binary star 由于两个子星靠得很近,在望远镜中不能分辨,只能从子星的视向速度的变化而判知的双星。两个子星谱线都已测到的叫做双谱分光双星,只测到一个子星谱线的叫做单谱分光双星。一般把分光双星都看作为密近双星。分光双星,特别是双谱双星,对于推求恒星质量、半径等基本参量极为重要。单谱双星也能对有关恒星的基本参量提供约束条件。分光双星中所包含的恒星种类繁多,涉及的物理、演化等问题甚为广泛。

分子云 molecular cloud 星际空间中分子集结的区域，大多分布在银河系的旋臂中。各类分子云的分子数密度很不相同，一般在每立方厘米 $10\sim10^7$ 之间，有的更大。分子云的温度为 $2\times10^3\sim100\times10^3$K。其半径在10个天文单位到10秒差距之间，质量在 10^{-4} 太阳质量到 10^6 太阳质量之间。主要有 OH、H_2CO、CH、CO、NH_3、CS、CN、C_2H、HCO^+、HC_3N、H_2O、CH_3OH、SiO、H_2S、HCO、SO、HCN 等星际分子。最著名的分子云是位于银河系中心的人马座A和人马座B2，已发现的星际分子绝大多数都能在这里找到。猎户座A则是最引人注意的一个研究对象，从CO谱线观测得知，它的CO包层直径达20光年，著名的猎户座大星云也是它的一部分。在猎户座A中不仅探测到种类很多的分子，还发现了像KL源（温度低于600K的延展红外源）以及若干分离的红外星、OH、H_2O、CH_3OH 和 SiO 天体微波激射源等特殊天体。因此一般认为猎户座A是一个形成新恒星的区域。

弗里德曼宇宙模型 Friedmann model 1922年，即爱因斯坦提出宇宙常数后几年，前苏联数学家弗里德曼解爱因斯坦引力场方程，得到均匀的各相同性宇宙非静态时空度规

$$ds^2 = R^2(t)\left[\frac{dr^2}{1-kr^2} + r^2(d\theta^2+\sin^2\theta d\phi^2)\right] - c^2dt^2$$

式中 r,θ,ϕ 为球坐标，t 为宇宙时，k 为空间曲率算符，$R(t)$ 为宇宙距离标度因子，从而提出了膨胀宇宙模型。1927年比利时天文学家勒梅特获得了导致距离-红移的线性关系的弗里德曼方程的解，他用 $R(t)$ 随时间的变化描述宇宙演化。1929年，哈勃(Hubble)发现星系退行速度与距离成正比，从观测上支持了弗里德曼宇宙模型。凡宇宙常数 $\Lambda=0$ 的均匀的、各向同性的宇宙模型，通称为弗里德曼宇宙。弗里德曼宇宙是一个不稳定的、膨胀着的体系。

辐射平衡 radiative equilibrium 一个稳定的天体中，每一个小体元的内能必须保持不变。这就要求每一个小体元在单位时间内损失的能量等于获得的能量。在恒星大气和某些恒星的内部，能量转移或交换主要是通过辐射来进行的。于是能量平衡就转化为辐射平衡。设辐射场的强度为 $I_\nu(\theta)$，发射系数和吸收系数分别为 j_ν 和 χ_ν，其辐射平衡可以表示为

$$\int_0^\infty\int_{4\pi} j_\nu d\omega d\nu = \int_0^\infty\int_{4\pi}\chi_\nu I_\nu(\theta) d\omega d\nu$$

式中 $d\omega$ 为立体角元，ν 为频率。辐射平衡是稳定恒星大气理论的一个基本出发点。

辐射转移理论 theory of radiative transfer 辐射是天体上能量传输的一种基本方式。辐射转移理论研究辐射转移规律，探讨辐射通过既有吸收又有发射的介质时的变化情况。它涉及辐射场的物理状态以及辐射和物质的相互作用等。辐射转移理论最主要的内容是建立辐射转移方程，并在一定的条件下求解。辐射转移方程的一般形式为

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -I_\nu\chi_\nu\rho + j_\nu\rho$$

式中 I_ν 为辐射强度，ds 为沿辐射方向的距离元，j_ν 和 χ_ν 分别为发射系数和吸收系数，ρ 为物质密度。正常恒星大气的厚度远小于恒星半径，可以忽略大气层的曲率，看作平面平行层。设大气垂直线深度为 h，h 的负方向和辐射方向的夹角为 θ，$ds=-dh/\cos\theta$，引入光学深度 $\tau_\nu=\int\chi_\nu\rho dh$，源函数 $S_\nu=j_\nu/\chi_\nu$，辐射转移方程成为

$$\cos\theta\frac{dI_\nu(\theta,\tau_\nu)}{d\tau_\nu} = I_\nu(\theta,\tau_\nu) - S_\nu$$

它的解是

$$I_\nu(\theta,\tau_\nu) = \int_{\tau_\nu}^\infty S_\nu e^{-(t_\nu-\tau_\nu)\sec\theta}\sec\theta dt_\nu \cdots\left(0\leqslant\theta\leqslant\frac{\pi}{2}\right)$$

$$I'_\nu(\psi,\tau_\nu) = \int_0^{\tau_\nu} S_\nu e^{-(\tau_\nu-t_\nu)\sec\psi}\sec\psi dt_\nu \cdots\left(0\leqslant\psi\leqslant\frac{\pi}{2}\right)$$

对真吸收，在局部热动平衡假设下，$S_\nu=B_\nu$，B_ν 为普朗克函数，此时，恒星表面向外的辐射为

$$I_\nu(\theta,0) = \int_0^\infty B_\nu e^{-t_\nu\sec\theta}\sec\theta dt_\nu。$$

光球 photosphere 太阳大气最低的一层。即一般用白光所观测到的太阳表面，厚度仅500公里左右。我们接收到的太阳能量基本上是光球发出的，光谱实际上就是光球光谱，它由连续光谱和大量吸收线组成。光球各部分的亮度很不均匀，在非扰光球中布满米粒组织。在光球活动区有黑子、光斑，偶尔还有白光耀斑。它们的亮度、物理状态和结构都相差很大。即使不考虑活动区和米粒组织，光球上各部分的亮度也是不同的，日面中心区域最亮，愈靠边缘愈暗，这种现象称为临边昏暗。平均起来，非扰光球上每平方厘米每秒发出的辐射流量为 6.3×10^{10}erg，由此可以算出光球的有效温度为5770K。

谷德带 Gould Belt 在太阳附近聚集的大量亮于7等的O、B型星的带状恒星集团，长约700秒差距，宽约70秒差距，其中心平面与银道面交角平均约16°，由美国天文学家谷德所发现。谷德带从猎户臂的下端伸出，指向银心。带中约有20万颗恒星，绝对目视星等为－13等。若假设谷德带是从一个点源扩开来的，则根据带内恒星的运动状况可推断其年龄约为 4×10^{7} 年，这与带中B型星的演化年龄相吻合。

哈勃 Edwin Powell Hubble（1889～1953） 美国天文学家，星系天文学的奠基人，观测宇宙学的开创者，被尊为一代宗师。哈勃对20世纪天文学作出了许多贡献，其中最大者有二：一是确认星系是与银河系相当的恒星系统，开创了星系天文学，建立了大尺度宇宙结构的新概念；二是发现星系的红移–距离关系，促使现代宇宙学的诞生。1914年他开始研究星云的本质，提出有一些星云是银河系内的气团，另一些星云可能是更遥远的天体系统。1924年发现仙女座大星云的造父变星，根据周光关系，推出它在银河系之外，是和银河系一样的恒星系统。多年来关于旋涡星系是近距天体还是银河系之外的宇宙岛的争论就此结束，从而揭开了探索大宇宙的新的一页。20世纪初，斯里弗（Slipher）对旋涡星系光谱作过多年研究，发现谱线红移现象。哈勃在此基础上，根据自己测定的距离资料，于1929年指出星系的距离越远，红移越大。若假设红移是星系视向运动的多普勒效益，则红移–距离关系表明，越远的星系退行的速度越大，从而意味着那部分宇宙在膨胀。后来，人们把红移–距离之间的线性关系称为哈勃定律。此外，他在1926年提出了河外星系的形态分类法，被称为哈勃分类，一直沿用至今。

哈勃常数 Hubble constant 河外星系退行速度和距离的比值，它是一个常数，通常用 H 表示。单位是公里/（秒·百万秒差距）。这个比值有时简称速度–距离比，或哈勃比。在相对论宇宙学中，哈勃常数可与宇宙标度因子 $R(t)$联系起来：$H=R(t)/R(t)$。在某些宇宙学中，哈勃常数是时间的函数，通常用 H_0 表示哈勃常数的现代值，并把 H 称为哈勃参量。

1929年哈勃首次发现河外星系的视向速度与距离成比例，比值为500。1931年哈勃和哈马逊（Humason）第二次测定 H_0 为538，后又修订为526。哈勃定 H_0 时，应用造父变星和星系中的最亮星来标定距离。1952年巴德（Baade）指出，仙女星系中造父变星的星等零点变动1.5等。由此哈勃常数应修订为 $H_0=260$。

1958年桑德奇（Sandage）指出：哈勃所说的最亮星实际上位于电离氢区，因此要再加上1.8等的星等改正，从而把哈勃常数降低为 $H_0=75$。1974～1976年桑德奇和塔曼（Tammann）又用七种距离指标重新修订哈勃常数，得到 $H_0=55$，只有当年哈勃测定值的1/10。这就是说，按哈勃定律推算星系的距离，比哈勃当年所得的结果增大10倍。在这期间，范登堡（van den Bergh）用九种距离指标，定出哈勃常数为95；塔利和费希尔（Fisher）利用21厘米线宽和绝对星等的关系，得到 $H_0=84$；德沃库勒（de Vaucouleurs）则给出 H_0 平均为 100 ± 10。

1994年底皮尔斯（Pierce）等利用地面望远镜，对位于室女星系团核心区的星系NGC4571中的三个造父变星，进行了测量，得到这个星系团的距离为 14.9 ± 1.2 百万秒差距，由此定出 $H_0=87\pm7$。同年10月，弗利德曼（Freedman）等利用空间望远镜的高灵敏度和高分辨

率,成功地测量了室女星系团旋涡星系 M100 中的 20 个造父变星,得到这个星系的距离为 17.1±1.8 百万秒差距,从而定出哈勃常数为 80±17。最近萨哈(Saha)等用 Ia 型超新星定标距离,给出 $H_0=54\pm8$。

哈勃常数的重要性不仅在于通过测量遥远天体的红移,得到它的视向速度,利用哈勃定律,进而得到该天体的距离,还在于它跟宇宙年龄 t_0 有关:如果宇宙物质密度很小,$t_0=1/H_0$;另一方面,从球状星团年龄的测定,要求宇宙年龄大于 1.14×10^{10}年。如果哈勃常数太大,就会产生矛盾,或许需要假设宇宙常数 Λ 不为零来解释。

哈勃定律 Habble law 1929 年,哈勃发现河外星系的视向退行速度 v(由红移算出)与距离成正比,即距离越远,视向速度越大,这个速度–距离关系叫作哈勃定律。它的形式是:

$$v = HD,$$

H 叫作哈勃常数。

1914 年,斯里弗(Slipher)测得了 13 个星系的视向速度,1916 年,特鲁曼(Truman)在扣去了太阳运动之后,发现剩余速度很大,并且主要是正的。维尔茨(Wirtz)引入 K 项来代表星系的普遍退行。1917 年,德西特(de Sitter)建立了他的静态宇宙模型,认为由于原子振动的变慢与距离成正比的,星系光谱的红移可能被错误解释为退行。由于 1923 年爱丁顿(Eddington)《相对论的数学理论》一书对这个理论的介绍,天文界才把星系视向速度的研究与德西特宇宙学联系起来。1929 年,哈勃(Hubble)根据 24 个已知距离和视向速度的星系,确立了退行速度与距离间的线性关系,并认为它是德西特效应的一级近似。但早在 1922 年,弗里德曼(Friedmann)解爱因斯坦引力场方程,就得到了均匀的、各向同性的宇宙动态时空度规,1927 年,勒梅特把它作为宇宙模型加以研究,并给出了更普遍的形式。1930 年,爱丁顿把红移作为非静态宇宙的膨胀效应。于是,哈勃定律就成了宇宙膨胀的观测证据。

亥姆霍兹–开尔文收缩时间 Helmholtz-Kelvin contraction time 引力收缩的时标。亥姆霍兹于 1854 年提出引力收缩是恒星的能源,他假设太阳和其他恒星在自引力的作用下不断收缩而释放能量。对于质量和半径分别为 M 和 R 的星体,其引力势能 $\Omega=-\eta GM^2/R$,式中 G 为引力常数,η 为与质量分布有关的因子,量级为 1。根据位力定理,对于一个处于准稳定平衡状态的无转动星体,在引力收缩时,R 变小,引力势能也相应变小,一部分引力势能将转变为星体内能 U

$$\Delta U=-\frac{1}{3(\gamma-1)}\Delta\Omega>0$$

式中 γ 为大于 1 的多方物态方程的幂指数;另一部分将转变为辐射能

$$\Delta E=\frac{4-3\gamma}{3(\gamma-1)}\Delta\Omega$$

对于稳定星体 $\gamma>4/3$,故 $\Delta E>0$。星体的光度为

$$L=\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=-\frac{3\gamma-4}{3(\gamma-1)}\frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}t}$$

如果原始星体物质处于无限弥漫状态,它收缩到半径为 R 的球体的时间约为

$$t=\frac{3\gamma-4}{3(\gamma-1)}\frac{GM^2}{RL}$$

这就是亥姆霍兹–开尔文时间。对于太阳来说 $\gamma=5/3$,$t\approx5\times10^7$ 年。

赫罗图 HR diagram 恒星光谱型和光度的关系图,是丹麦天文学家赫茨普龙(Hertzsprung)于 1911 年和美国天文学家罗素(Russell)于 1913 年分别发现的。在光谱型–绝对星等图上,恒星不是均匀分布,而是明显地分成几群或带状。90%的恒星沿对角线分布,形成“主序”,主序又称矮星序;另一个相当密集的群称为巨星序。主序下面是亚矮星序,图的下面有一支称为白矮星序,还有不少星分散在图的上部,形成超巨星序。赫罗图在恒星演化研究中有非常重要的作用。

黑子 spot 太阳光球上经常出现的暗黑斑点。充分发展的黑子由较暗的核(本影)和围绕它的较亮的部分(半影)构成。黑子经常成对或成群出现,复杂的黑子群由几十个大小不等的黑子组成。小黑子线度约 1000 公里,大黑子的线度可达 20 万公里。在日面上黑子出现的情况经常变化,黑子数年平均的变化周期约为 11 年,黑子在日面纬度的分布也以 11 年

为周期有规律地变化。

恒星的形成 formation of star 一般认为，恒星是由低密度的星际物质凝缩而成的。1955年前苏联天文学家阿姆巴楚米扬(Амбарцумян)提出相反的看法，认为恒星是由高密度的星前物质形成的，但他没有说明形成的过程，大多数天文学家不接受这种看法。

银河系星际物质的密度约为 $10^{-24}\sim10^{-23}$ g/cm^3 量级，往往凝聚成团块，称作星云。星云可分为两类：第一类，氢已经完全电离，它的温度在 10^4K 左右，称作电离氢云；另一类，氢并未电离，温度约在100K以下，称作中性星云，密度比星际物质约高一个量级。若星云的温度在100K左右，密度为 $10^{-23}\sim10^{-22}g/cm^3$，星云的质量至少需要达到 $10^3\sim10^4 M_\odot$ 的量级才能收缩。由观测得知，恒星质量大多在 $0.1\sim10 M_\odot$ 范围内，平均密度大多在 $10^{-3}\sim 10g/cm^3$ 范围内。所以星云形成恒星，除了凝聚之外，还要经历一个碎裂的过程。从观测得知，存在着质量在 $0.5\sim10^4 M_\odot$ 之间，密度在 $10^{-23}\sim10^{-10}g/cm^3$ 之间的各种星云，这些星云有着不同程度的凝聚现象。

从星云凝聚为恒星，半径缩小到百万分之一，平均密度增加 10^{16} 倍以上，这是一个快收缩过程。由热运动形成的向外压力远远抵不住向内引力，物质急速内聚，中心密度增高更快，当中心密度达到 $10^{-13}g/cm^3$ 时，中心部分逐渐变得不透明，热量就不易外逸，致使温度增加。当中心部分温度达到2000K时，氢分子开始成为原子，吸收大量热量，使压力骤降，抵不住引力，因而中心崩陷为体积更小、密度更大的内核。外围形成一股强大的星风。速度达每秒几百万公里。对大质量恒星来说，辐射压的向外作用力或许更为重要。这种作用力不仅足以阻止星云外围物质进一步落向中心，而且还会把它们驱散。全部的星风物质大约在 $10^4\sim10^5$ 年内逐渐消失，恒星才显露出来。

快收缩结束后，慢收缩开始。在这一过程中，星云内每一小块物质所受到的引力几乎和向外的压力相等，形成所谓准平衡状态。收缩增加内部热量，其中部分热量辐射到星云外部，部分热量使内部尤其是中心部分的温度上升。等到中心部分温度达到700万度以上，氢聚变为氦的热核反应所产生的热量足以和向外辐射的热量相当时，星云便不再收缩，达到流体静力平衡状态，成为一颗正常的恒星，叫主序星。处于从星云过渡到主序前慢收缩阶段的天体叫原恒星。

恒星的演化 evolution of star 不同质量恒星的演化过程是根据恒星内部结构理论推算出来的。这一理论主要是以流体静力平衡和热核反应供给能量为基础的。在流体静力平衡的条件下，一般恒星的中心温度和恒星质量成正比，如太阳的中心温度为1500万度左右，在这样的高温下，能产生热核反应，保证能量来源。爱因斯坦在20世纪初提出质量和能量之间的关系。直到30年代末，贝特(Bethe)和魏茨泽克(Weizsäcker)才根据核反应的实验数据和热核反应的机理，提出氢聚变为氦的碳氮循环的热核反应来说明恒星的巨大能量来源。

在恒星中心部分氢聚变为氦的过程中，当氦的质量约占恒星总质量的12%时，恒星的结构就发生明显变化，开始离开主星序。主序星存在质光关系，即它的光度和质量的3.5次方成正比。因此，大质量恒星的氢的消耗快得多，在很短的时间内，中心部分氦的质量就达到恒星总质量的12%，因而停留在主星序的时间比小质量星远为短促。所以高光度、大质量的O、B型星停留在主星序上只有几百万年、几千万年，而低光度、小质量的K、M型星停留在主星序上可以达几千亿年、几万亿年之久。太阳停留在主星序阶段约100亿年，到目前已停留了50亿年左右。

质量较大的恒星中心温度都在2000万度以上，适宜进行碳氮循环的氢聚变为氦的热核反应，反应的速率和温度18次方成正比，产能率高，因而温度梯度大，使中心部分形成对流核心；质量小于 $1.5 M_\odot$ 的恒星，中心温度只有一千几百万度，在氢聚变为氦的热核反应中，质子-质子反应取代碳氮循环，成为主要能量来源。反应速率和温度的较低次方成正比，不产生对流核心，表面附近却具有很厚的对流层。

在赫罗图上恒星脱离主星序向右演化，半径和光度逐渐增加，因质量不同而经历不同的演

化过程，成为红巨星。然后向左演化，经过脉动不稳定区，越过主星序。一般要经过质量抛射，甚至像新星、超新星那样的爆发然后演化成行星状星云的中心星、白矮星或中子星。恒星演化的末期，内部各种能源已经完全耗尽，慢慢冷却。根据流体力学平衡条件，不同质量的星体，最终将形成白矮星、中子星或黑洞。

雷达天文学　radar astronomy　射电天文学的一个分支。主动向天体（或人造天体）发出无线电波，并接收反射的回波，通过对回波的处理和研究以探讨天体的物理和几何结构。由于雷达发射功率的限制，雷达天文学主要研究太阳系内的天体。

流星雨　meteoric shower　从天上一点迸发出焰火般的大量流星的现象。该点称为辐射点。流星雨以其辐射点所在的星座命名。这是一种周期性现象，因在绕日轨道上运动的流星群闯入地球大气层而形成，其中一些每年出现的数量不同。如狮子座流星雨那样蔚为壮观的流星雨每33年才有一次，与坦普尔彗星回归周期相同。长期以来认为流星雨与彗星及其碎裂后的残余物质密切相关。

类星体　quasar　20世纪60年代发现的一种致密河外天体。在照相底片上具有类似恒星的象，它们的光谱有巨大的红移。大多数天文学家把类星体的红移解释为由宇宙膨胀而引起的多普勒效应，因此类星体是我们观测到的最遥远、最年轻的河外天体，它们的光度比超巨星系还大千百倍，各种辐射的变化时标表明其发射区很小。类星体核中的黑洞吸积过程有可能提供足够的能量。许多类星体周围有晕，并有两个被证认为基底星系，这表明类星体就是最活动的活动星系核。

脉冲星　pulsar　具有短周期辐射的一类恒星。1967年英国天文学家休伊什（Hweish）和贝尔（Bell）发现了第一颗脉冲星，被誉为20世纪60年代天文学的四大发现之一，因而获得1974年诺贝尔物理学奖。脉冲星的主要特点是：周期性地发射脉冲信号；脉冲周期很短，从毫秒到秒的量级；周期非常稳定，每年只增长百万分之一秒到千亿分之一秒；脉冲辐射高度偏振。现在普遍认为脉冲星是具有极强磁场的快速自转的中子星。

谱线轮廓　line profile　描述光谱线的能量随波长的相对分布的图。

日珥　solar prominences　突出日面边缘的一种太阳活动现象。它们比太阳圆面暗弱得多，一般情况下被日晕（即地球大气所散射的太阳光）淹没，不能直接看到，必须用太阳分光仪、单色光观测镜等仪器，或者在日全食时才能观测到。日珥的形状变化万千，有的像浮云，有的似喷泉，还有圆环、拱桥、火舌、篱笆等形状的，日珥的大小不一，一般说来，长约20万公里，高约3万公里，厚约0.5万公里。日珥主要存在于日冕中，但下部常与色球相连。日珥的光谱包括许多发射线和暗弱的连续谱，由光谱分析得到，日珥的温度约7000K，湍流速度约4公里/秒。

日冕　solar corona　太阳大气的最外层。从色球边缘向外延伸到几个太阳半径，甚至更远。日冕由很稀薄的、完全电离的等离子体组成，其中主要是质子、高度电离的离子和高速运动的自由电子。

色球　chromosphere　太阳大气的中间一层，位于光球之上。由于地球大气中的分子和尘埃粒子散射了太阳辐射而形成“蓝天”，色球和日冕完全淹没在蓝天之中。只有在日全食的短暂时刻，观测者才能用肉眼看到太阳圆面周围这一层美丽的玫瑰红色的辉光。在厚度约2000公里的色球层里，温度从光球顶部的4600K增加到色球顶部的几万度。色球是一个充满磁场的等离子体层，由于磁场的不稳定性，常会产生激烈的耀斑爆发，以及与耀斑共生的爆发日珥、冲浪、喷焰等许多动力学现象。耀斑爆发时还产生大量的远紫外辐射、X射线辐射和高能粒子流，对日地空间和地球高层大气影响很大。因此，色球的研究无论对太阳物理，还是对空间物理和地球物理，都有重要的意义。

甚大阵　very large array（VLA）　美国国家射电天文台在新墨西哥州建造的射电望远镜阵。共有27个口径为25m的抛物面天线，排列成Y型，每臂长约1km，观测波长可短至1cm。甚大阵采用一种综合口径技术，其分辨率相当于

口径为27km的一个单抛物面天线。

甚长基线干涉仪 very long baseline interferometer(VLBI) 基线长达几千公里以上分辨本领高达万分之几角秒的射电干涉仪。采用由原子钟控制的高稳定度的独立本机振荡系统和磁带记录装置;以两个或多个天线分别在同一时刻接收同一射电源的信号,各自记录在磁带上,再把磁带直接送到或把记录资料通过卫星送到处理机中进行相关处理。这种干涉仪常用于测定射电源的精确位置和亮度分布,以及测量洲际基线距离和方向的变化。

太阳风 solar wind 从太阳外层大气不断发射出的稳定的粒子流。太阳外层大气——日冕,具有极高的温度,作用于日冕气体上的引力不能平衡压力差,因此日冕中很难维持流体静力平衡,不可能处于稳定静止状态,而是向外膨胀,热电离气体粒子连续地向外流出,形成太阳风。近几年来的观测表明存在于日冕中的冕洞同地球附近的太阳风有很好的相关性,而长寿命的冕洞(M区)更是太阳风的风源。

太阳活动 solar activity 亦称太阳扰动。太阳大气层里一切活动的总称。太阳活动主要指太阳黑子、光斑、谱斑、耀斑、日珥和太阳射电等的变化现象。随着太阳活动的变化,太阳发出的辐射会发生变化,并引起地球上极光、磁暴和电离层扰动等现象。

天体演化学 cosmogony 天文学的一个分支。研究各种天体和天体系统的起源和演变过程。利用各层次天体(行星、恒星、星系)的观测资料,依据天文学、物理学、化学、地球科学、数学等学科的理论,研究它们的产生、发展和衰亡的历史。

微波背景辐射 microwave background radiation 来自宇宙空间背景的各向同性微波辐射,也称为宇宙背景辐射。20世纪60年代,美国贝尔电话实验室工程师彭齐亚斯(Penzias)和威尔逊(Wilson)为了改进卫星通讯,建立了高灵敏度喇叭形接收天线。为了检验该天线系统的低噪声性能,他们避开噪声源将天线指向天空测量。1964年春,他们发现无论天线指向什么天区,总有消除不掉的背景噪声。它既没有周日变化,也没有季节变化,即与地球自转和公转无明显关系。1965年初,他们对天线进行了彻底检查,排除了这种噪声来自天线系统本身的可能性。因此,它是来自空间的一种辐射。

微波背景辐射的最重要特征是具有黑体辐射谱,相当于绝对温度2.5～4.5K,习惯称为3K背景辐射。黑体谱现象表明,微波背景辐射是极大的时空范围内的事件。因为只有通过辐射和物质之间的相互作用,才能形成黑体谱。由于现今宇宙空间的物质密度极低,辐射与物质之间的相互作用很小,所以,我们今天观测到的黑体谱定起源于很久以前。微波背景辐射应具有比遥远星系和射电源提供的更为古老的信息。

微波背景辐射的另一个特征是具有极高度的各向同性。由于天顶方向和地平方向大气厚度不同,银河系物质分布不均匀,各向同性就排除了这种辐射的地球和银河系起源的可能性;各向同性也表明,在各个不同方向上,在各个相距非常遥远的天区之间,应当存在过相互联系。

除微波波段外,在从射电到γ射线辐射的各个波长上,大都进行过背景辐射探测,结果是微波波段的辐射最强,其强度超过其他所有波段的背景辐射的总和。流行的看法认为背景辐射起源于热宇宙的早期。这是对大爆炸宇宙学的有力支持。早在40年代,伽莫夫(Gamow)、阿尔菲和海尔曼根据当时已知的氦丰度和哈勃常数等资料,发展了热大爆炸学说,并预言宇宙间充满具有黑体谱的残余辐射,其温度约为几K或几十K。直到1964年人们才认真加以研究,狄克(Dicke)等还专门设计了一台小型低噪声天线,准备探测这种辐射。但这一装置还未完成,彭齐亚斯和威尔逊已无意中发现了3K微波背景辐射。

微波背景辐射的发现被认为是20世纪天文学的一项重大成就,它对现代宇宙学研究有着深远影响。因而,这一发现获得了1978年诺贝尔物理学奖。

星等 magnitude 表示天体相对亮度的数值。喜帕恰斯(Hipparchus)最早把全天人眼可见的星按感觉亮度分为6等。最亮的20颗星

定为1等。亮度随星等数目的增加而降低。后来赫歇尔(J.F.Herschel)发现,1等星比6等星亮约100倍。于是普森(Pogson)用公式

$$m_2 - m_1 = -2.5\lg\frac{I_2}{I_1}$$

联系两个天体的星等 m_1、m_2 和它们的亮度 I_1、I_2。这个星等尺度的定义一直沿用至今。星等尺度的零点由规定某颗星的星等值来确定。天体光度测量直接得到的星等同天体的距离有关,称为视星等,它反映天体的视亮度。一颗很亮的星可以由于距离远而显得很暗(星等数值大);而一颗实际上很暗的星由于距离近而显得很亮(星等数值小)。为了比较天体的发光强度,采用绝对星等。绝对星等M的定义是,假想把天体置于距离10秒差距处所得到的视星等。若已知天体的视差 π(以角秒计)和经星际消光的视星等 m,可按下列公式计算绝对星等

$$M = m + 5 + 5\lg\pi。$$

星际物质 interstellar matter 恒星之间的物质。包括星际气体、星际尘埃和各种各样的星际云,还可包括星际磁场和宇宙线。星际物质的总质量约占银河系总质量的10%,平均密度 10^{-24}g/cm^3,温度几K到千万K。一般认为恒星早期是由星际物质凝聚而成的。而恒星又以各种爆发、抛射、流失的方式把物质送回星际空间。

星团 stellar cluster 由十个以上恒星组成的,被各成员星之间的引力束缚在一起的恒星群。星团分成球状星团和疏散星团。前者由几万到几百万颗老年恒星组成,呈球状向中心密集,年龄约为一百亿年;后者由几百颗年轻恒星组成,形状不规则且较松散,年龄相差很大,年轻的只有一百万年,老年的有几十亿年甚至一百亿年。

星系 galaxy 由几十亿至几千亿颗恒星以及星际气体和尘埃物质等构成,占据几千光年至几十万光年的空间的天体系统。银河系就是一个普通星系,银河系以外这样的系统称为河外星系,一般简称星系。用肉眼或小望远镜观测,星系是一个云雾状天体。在一个相当长的时期里,人们激烈争论着:它们是银河系中的星云,还是银河系之外的宇宙岛?直到20世纪20年代才确立了它们的河外性质。星系包含形态多样、性质各异的许多类型,主要有椭圆星系、旋涡星系、棒旋星系和不规则星系。星系是宇宙物质存在的基本形式之一。

星协 stellar association 1947年前苏联天文学家阿姆巴楚米扬(Амбарцумян)发现O、B型恒星在天球上分布有集结现象,他认为这不是偶尔的投影结果,而是一种相互之间有物理联系的恒星群,他把这种比星团稀疏得多的恒星群称为星协。星协分两种:一种叫O星协,是O、B型恒星的集合,几乎所有的O、B型恒星都在O星协中,只有个别位于其他空间;另一种叫T星协,是金牛座T型变星的集合。因为O、B型恒星和金牛座T型变星都是十分年轻的天体,所以星协也是年轻的天体,年龄只有百万年数量级。

星云 nebula 银河系以内、太阳系以外一切非恒星状的气体尘埃云。按形态分有:广袤稀薄而无定型的弥漫星云,具有亮环和高温中央星的行星状星云,以及还在不断向四周扩散的超新星剩余物质云。按发光性质分有:被中心或附近的高温照明星(早于B1型)激发发光的发射星云,因反射和散射低温照明星(晚于B1型)的辐射而发光的反射星云,部分地或全部挡住背景恒星的暗星云。亮度变化的星云称变光星云。

X射线爆发 X-ray burst 宇宙中X射线辐射的突然显著增强,是20世纪70年代天体物理学的重大发现之一。X射线爆发的主要特征是:爆发上升时间≤1秒,持续时间由几秒到几十秒;重复爆发但没有准确周期;爆发间隔大多数由几小时到几十小时,也有几秒到几分的,前者称为Ⅰ型X爆发,后者称为Ⅱ型X爆发。

X射线脉冲星 X-ray pulsar 发射短周期X射线脉冲的天体,脉冲周期短而且稳定。这类X射线源是密近双星。

耀斑 solar flares 太阳大气(很可能在色球–日冕过渡层)中一种不稳定过程。在短暂的时间(约 10^2~10^3 秒)内释放大量能量(10^{30}~10^{33}尔格)引起局部区域瞬时加热和各种电

离辐射、粒子辐射(质子、电子、中子等)的突然增强。除少数例外,在白光中不能观测到耀斑。在可见光波段,耀斑的辐射增强主要是在某些谱线上,其中以氢的 H_α 和电离钙的 H、K 线最为突出。随着射电天文和航天技术的发展,观测耀斑的手段扩展到射电、紫外线、X 射线、γ 射线等波段。

引力半径 gravitational radius 爱因斯坦广义相对论方程的施瓦氏解给出的相应于黑洞视界的半径。从这个半径的球面和球内发射的光线或其他任何粒子都不能逃脱出来。

引力红移 gravitational redshift 在引力场中的光源发出的光谱线向长波方向(红端)偏移的现象。偏移量与源和观测者两处引力势差的大小成正比。广义相对论认为,在引力场中,光振动要减慢,对应的波长变长。最初在白矮星(天狼星伴星)的光谱中发现这种现象。引力红移的大小与相对论的理论值相符合。

引力坍缩 gravitational collapse 恒星演化晚期的一种猛烈变化过程。恒星核区经过氧燃烧的核反应阶段之后,如果质量大于昌德拉塞卡极限,并且由铁族核素构成时,它的等效多方指数 γ 接近临界值 4/3,这时恒星中心温度很高,各类过程产生的中微子将中心部分的能量迅速带走,使恒星核心区很快冷却,以致辐射压力不足以抵御自引力的作用,形成引力坍缩。在引力坍缩过程中,中心部分形成致密星,并可能伴有大量能量释放和物质抛射。

宇宙常数 cosmological constant 1917 年,爱因斯坦为了解释物质密度不为零的静态宇宙的存在,在他的场方程中引进的一个与度规张量成比例的项,用符号 Λ 表示,称为宇宙常数。1922 年,弗利德曼(Friedmann)提出了膨胀宇宙模型。1929 年,哈勃(Hubble)发现了宇宙学红移,使弗利德曼宇宙模型得到观测的支持。宇宙不再是静态的,宇宙常数的引入似乎不再必要。爱因斯坦曾感慨地说,引入宇宙常数是他毕生最大的错误!然而,宇宙常数的引入并不违背任何基本原理,有些学者如爱丁顿(Eddington)、德西特(de Sitter)、泽尔多维奇(Zel'dovich)认为不宜轻易抛弃。它可能代表宇宙真空场的能量-动量张量与可能存在于物质之间的斥力。当观测给出的哈勃常数较大,导致宇宙年龄比球状星团年龄还小时,人们总想用 $\Lambda \neq 0$ 来解释。估计 Λ 的上限为 10^{-57}厘米$^{-2}$。

灾变说 catastrophic hypothesis 一种太阳系起源学说,认为太阳系是在一次偶然的巨大事件中造成的。近代灾变说的代表是美国地质学家张伯伦(Chamberlin)于 1900 年和英国天文学家金斯(Jeans)于 1917 年提出的学说。认为曾有一颗恒星运动到太阳附近,造成了巨大的潮汐隆起物,脱离太阳后集结成行星。历史上出现过的太阳系起源灾变说都已遭否定。

质光关系 mass-luminosity relation 恒星质量和光度之间的一种近似关系。最早由哈姆(Halm)提出,1919 年赫茨普龙(Hertzsprung)从观测上加以证实。1924 年爱丁顿(Eddington)从理论上导出绝对光度 L、质量 M 的恒星有 $L = kM^{3.5}$的简单关系,其中 k 为常数。质光关系不仅提供了一个估计恒星质量的重要方法,而且为研究恒星内部结构和建立各种理论模型提供了一个判据。除物理性质特殊的巨星、白矮星和某些致密天体外,占恒星总数的 90% 的主序星都符合质光关系。

致密星 compact star 恒星在核能耗尽后,经引力坍缩而形成的星体。致密星主要有三种类型:依靠简并电子的压力与引力平衡形成的星体,称为简并矮星,其物质密度约为 10^5~10^7g/cm^3。白矮星就是一种简并矮星;依靠简并中子的压力与引力平衡形成的星体,称为中子星,其物质密度约为 10^{13}~10^{16}g/cm^3;没有任何力能与引力平衡时则形成黑洞,天鹅座 X-1 等是可能的黑洞候选者。星体在引力坍缩后形成哪一种致密星,主要取决于它的剩余质量。对于无转动的星体,简并矮星的最大质量约为 1.44 太阳质量,中子星的最大质量约为 2 个太阳质量。根据物态的一般性质可以证明,质量大于 3.2 太阳质量的无转动星体,将发生无限引力坍缩,形成黑洞。

中子星 neutron star 主要由简并中子组成的致密星。1932 年发现中子后不久,朗道(Ландау)就提出可能有由中子组成的稳定致密星。1934 年巴德(Baade)和兹威基(Zwicky)

也分别提出了中子星的概念，而且指出中子星可能产生于超新星爆发。1939 年奥本海默和沃尔科夫通过计算建立了第一个中子星模型。1967 年英国天文学家休伊什(Hewish)和贝尔(Bell)发现了脉冲星。不久，就确认脉冲星是快速自转的中子星。中子星外层是固体外壳，厚约 1 公里，密度约为 $10^{11}\sim10^{14}$g/cm^3，由各种原子核组成的点状结构和简并的自由电子气组成。外壳内是一层主要由中子组成的流体，密度约从 $10^{14}\sim10^{15}$g/cm^3，在这层中还有少量的质子、电子和 μ 介子。中子星内部的密度高达 10^{16}g/cm^3，可能是超子流体，固态的中子核心或者中子流体中的 π 介子凝聚。中子星的质量上限为 2 倍太阳质量。中子星半径的典型值约为 10 公里。

周光关系 period-luminosity relation 造父变星的光变周期和光度之间的一种关系。即造父变星的光变周期越长，其光度也越大。1908～1912 年美国哈佛大学天文台勒维特在研究小麦云的 25 个造父变星时发现了这一关系。它的重要性在于，只要发现造父变星，便可由其光变周期得到绝对星等，视星等由观测得到，于是可确定该星及其所在的恒星集团的距离。

主序星 main sequence star 银河系中大多数恒星在赫罗图上密集于由左上方到右下方的狭窄带区内，形成一个主星序。位于主星序内的恒星称为主序星。因为光度比超巨星、巨星和亚巨星小，主序星也叫矮星，光谱从 O 型到 M 型。光度从太阳光度的 10^{-3}到大于 10^5倍，半径从比太阳小一个量级到太阳的 20 倍左右。主序星的能量来源于核内氢聚变成氦的热核反应，恒星在这个阶段停留时间最长，占其寿命的大部分时间。

暴胀宇宙学 inflationary cosmology 认为宇宙在极早期经历了一个短暂的极度膨胀时期的宇宙模型。20 世纪 70 年代，宇宙学家面临着两个标准大爆炸模型不容易解释的疑难问题——视界疑难和平直性疑难，重新考虑了宇宙极早期的演化。暴胀宇宙模型首先由顾斯(A.H.Guth)于 1981 年提出，后来经过发展、改进。大统一时期(GUT Epoch)后期，随着宇宙膨胀温度下降到 10^{28}K 时，宇宙经历了一次从对称到破缺的真空相变。但由于量子涨落，宇宙的某些部分还会在对称假真空态停留一个短暂时间，其能量密度不为零，巨大的压力导致宇宙指数式膨胀。在 10^{-32}秒钟内宇宙的大小增加了 10^{50}倍，被称为宇宙暴胀。这一瞬间以后，宇宙的这些部分回到真的真空，暴胀停止，宇宙仍然按照大爆炸宇宙学预言的速度膨胀。暴胀宇宙学作为大爆炸宇宙学的补充，仅对宇宙极早期($10^{-35}\sim10^{-32}$秒)做局部修改，克服了标准宇宙模型的困难。

21 厘米辐射 21-centimeter radiation 基态氢原子从高能态(电子和质子的自旋平行)跃迁到低能态(电子和质子的自旋反平行)，产生的辐射。这一跃迁中释放的光子能量等于两个能级的能量差，因为能量很小，相应的波长较长，约 21 厘米，在无线电波段，故称 21 厘米射电辐射。它是探测星际、星系标中性氢分布的重要手段。

星云光谱 nebula spectrum 与恒星光谱(连续谱背景加吸收线)不同，典型的发射星云光谱是连续背景加发射线，又称“明线”光谱。产生这些谱线的元素种类和丰度与太阳类似，只是气体密度要低得多。但星云光谱研究的早期，天文学家也发现几条谱线不同于地球实验室里看到的任何谱线，其中最突出的一条绿色明线曾被认为是由星云所特有的元素“氙”(Nebulium)产生的。原子光谱的进一步发展揭示它只是普通元素在特殊条件下的一种辐射，即两次电离氧离子在高温低密的发射星云中产生的禁线。

引力透镜效应 gravitational lensing 来自遥远天体的光受到大质量前景天体的引力作用而弯曲，导致遥远天体增亮，有点象透镜成像的效应。起聚焦作用的前景天体被称为引力透镜。如果引力透镜不是恒星级天体，而是星系或星系团，引起光的偏转大得多，可形成两个或更多的像。1979 年作为第一个引力透镜效应发现的双类星体就是这样的例子。两个类星体具有相同的红移和类似的光谱，在天空的距离仅几弧秒。引力透镜效应对探测宇宙有重要意义：它使背景天体赠亮无疑提高了探测暗天体的能力；透镜天体可以是可见的，也

可以是不可见的,这为寻找银晕中的暗物质并确定其分布提供了一种手段。因为成像的光线经过的路程不同,几个像不会同时出现。如果第一个像突然发生一个爆发事件,我们来不及研究,可以等待第二个像的来临。这个时间延迟还能用来测量到透镜星系的距离,为哈勃常数的确定提供了新的方法。前景星系不是连续的,其中一个个恒星都起透镜作用,利用这种微透镜效应(microlensing)天文学家可以研究透镜星系的恒星组成。此外,研究前景星系团对背景类星体和背景星系的引力透镜效应是了解星系团中暗物质分布的有效途径,从而对宇宙大尺度结构研究作出贡献。

宇宙大尺度结构 large-scale structure of the universe 星系在宇宙大范围内的分布特征。利用各种距离测量技术,尤其是哈勃定律,给出了遥远星系的距离。我们不仅可以了解星系在天球上的分布,也可以研究它们在大尺度三维空间的分布。20 世纪 80 年代哈佛大学天文学家在一系列厚 6°的楔形薄片中给出了星系的位置,显示了到银河系 2 亿秒差距内的宇宙大尺度结构。一个显著的特征是星系和星系团的大尺度分布不是随机的,而是呈网状分布,一条条线或纤维围绕着相对“空”的巨洞(voids,也译为空洞),最大的巨洞直径约 1 亿秒差距。这意味着星系和星系团分布在巨大的“气泡(bubbles)”的表面,这些巨泡充满整个宇宙,巨洞是巨泡的内部,密集的星系团和超星系团位于几个巨泡相遇的地方。大多数理论天文学家相信星系的“多泡”分布以及在大于几百万秒差距尺度上的所有结构都直接起源于宇宙最早期的条件。已知宇宙中最大的结构之一是至少 2 亿秒差距长、7 千万秒差距宽、厚度仅约 5 百万秒差距的星系巨壁(Great Wall,也译为宇宙长城)。

Biophysics
生物物理学

生物物理学 biophysics 生物物理学是以物理学的理论和方法研究生命现象中的物理和化学规律的科学,是物理学与生物学相结合的一门边缘学科。20 世纪 50 年代后,物理学概念、思维方式及其技术向生命科学中渗透,生物物理学迅速发展成为一门独立的新学科,它使生物科学中的许多问题逐渐趋于明朗,并使生命科学从定性研究向定量研究发展,从描述现象到形成具有数学和物理基础的精确科学;同时,亦为物理学开拓了研究复杂体系规律的新方向,从而也促进了物理学自身的发展。生物物理学具有广泛的交叉性和渗透性,其内涵几乎涉及生物学的所有基本问题,主要分支学科有:分子生物物理、细胞与膜生物物理、感官与神经生物物理、生物控制论与生物信息论、理论生物物理、光生物物理、环境辐射生物物理、生物力学与生物流变学及生物物理技术等。

一、理论生物物理学
Theoretical Biophysics

理论生物物理学 theoretical biophysics 理论生物物理学是运用数学和理论物理学研究生命现象的一个领域。它把生命现象归纳起来,加以统一化,进行更深入系统的研究,建立物理概念体系,从而对生命现象有更深入的理解和更大的预见性。20 世纪理论物理的发展,如量子理论、非平衡态热力学与统计物理、非线性系统动力学及计算物理等,再加上生物控制论和信息论,对于研究生命现象作为一种特殊的复杂系统瞬态过程提供了一些方法和可能性。理论生物物理的主要研究内容有:量子力学与生物分子动力学、生命起源、进化与遗传、人脑的功能与活动、生态环境的稳定与变化规律及生物系统的复杂性等。

量子生物学 quantum biology 量子生物学是用量子力学的概念、原理和方法,从分子、原子及电子水平阐明生命现象的学科。1939 年 Jorolan 主张"突变是一种量子过程"。1945 年,薛定谔(Schrödinger)在其著作《生命是什么》一书中进一步系统地阐述了这一观念。20 世纪 70 年代以来,量子生物学得到迅速发展,主要研究内容有:生物分子的结构与构象、分子间和分子内的相互作用、能量转移和生物量子效应、致癌物质的结构与突变的量子理论及量子药理学等。

分子轨道法 molecular orbital method 用量子力学描述生物分子物理模型的一种近似处理方法。分子轨道理论认为:分子内每个电子的波函数都是原子轨道,组成分子的每个原子里的单电子的波函数通过融合构成分子轨道。当用分子中各个原子轨道的线性组合逼近分子轨道时,则该方法称为分子轨道-原子轨道线性组合(Molecular Orbital-Linear Combination of Atomic Orbitals,MO-LCAO)近似,

$$\Psi_{\mathrm{i}} = \sum C_{\mu\mathrm{i}} \phi_{\mu\mathrm{i}},\ \mu = 1,2,\cdots,n$$

分子轨道理论已被一系列近代实验所肯定,能较广泛地解释一些实验事实,因而在多原子结构近似方法中处于重要的地位。

量子药理学 quantum pharmacology 使用量子力学方法研究药理学问题的一门新兴学科。它使药理学研究从分子水平深入到电子水平,研究药物分子的活性构象。深入了解药物分子与其受体的相互作用,都需进行量子生物学计算。例如对增强放射治疗肿瘤临床效果的辐射增敏剂和自由基的增敏机理的探索,也成为量子药理学的一个重要内容。20 世纪 60 年代 Hansch 等人开创的药物定量构象关系(简称 QSAR),在药物筛选方面具有重大实际意义,使量子化学在药理学中的应用进入了一个新的阶段。

量子遗传学 quantum genetics 量子遗传学是利用量子力学方法研究遗传和变异等基本

生命现象分子机制的分子遗传学的新层次。分子遗传学在解释生命体遗传奥秘方面取得了巨大的成功,但要阐明一些现象的分子机制,如为什么双链 B-DNA 是右旋的,而双链 Z-DNA 却是左旋的,遗传密码子的简并度为什么不同,DNA 复制精确性的本质是什么,基因表达和突变中的分子识别机制等,都需要量子遗传学的研究。Ló wdin 提出的遗传密码的质子-电子对模型,解释 DNA 复制和突变机制获得了令人鼓舞的成功。

生物热力学 biothermodynamics 用热力学和统计物理学定量描述生命现象和生命过程的学科。起初经典热力学用平衡态和平衡态统计物理描述生命系统,物质或能量没有交换能得到维持平衡态结构。自 1969 年比利时的普利高津(I. Prigogine)提出耗散结构理论以来,人们已认识到非平衡态是有序之源,生命系统是一种典型的耗散结构,它需要与环境交换能量、物质或信息才能维持一种“动态平衡”。高度复杂有序的生命现象是非平衡的开放系统中的一个过程,而不是一种物质的状态。普利高津学派用非线性数学和随机理论阐明涨落与耗散结构的相互关系,把非平衡的物理、生物和化学等系统的自组织问题当作一个新的方向来研究,从而推进了非平衡热力学统计物理的发展。非平衡态热力学可用于定量描述许多生命现象,如物质传输、能量传递、神经传导、肌肉收缩、蛋白质的聚合和多晶现象等,而不依赖物理模型和机制动力学方程,但也有一定的限制,如不能由它来提出模型。

生物熵 bioentropy; biological entropy 生物系统作为热力学系统时的状态函数。经典热力学对熵的定义是:系统在一微过程中熵增量 dS,为该系统在通过一微可逆过程到达同样状态时吸收的热量 δQ 与绝对温度 T 之比,即 $dS=\delta Q/T$。$\delta Q/T$ 的积分值即状态函数熵 S,

$$S_B - S_A = \int_A^B \delta Q/T。$$

由热力学第二定律,任何热力学系统不可逆过程总使系统熵增加,即 $dS \geqslant 0$,系统自发的趋于平衡,称为熵增加原理。根据统计物理,孤立系统的熵 S 与微观相貌数 W 之间存在玻尔兹曼(Boltzmann)关系,为 $S=k\ln W$,k 为玻尔兹曼常数。熵 S 是系统无序性的量度,平衡态时为无序,而非平衡态是有序之源。根据热力学第二定律,自然界演化是从有序到无序,而生命的发生、演化、生长过程显然是从无序到有序,生命现象是高度有序的。生命使其内部的熵降低,这是无生命世界难以实现的。1945 年,薛定谔在其名著《生命是什么》中指出:一个开放系统的熵不一定增加,它可以从外界引入“负熵”;生命正是一个开放系统。外部引入的熵变 $\Delta S_e \leqslant 0$,内部产生的熵 $\Delta S_i \geqslant 0$,系统的总熵变 ΔS 可正可负,为 $\Delta S=\Delta S_e+\Delta S_i$,只要 $\Delta S_i \geqslant 0$,就不违反热力学第二定律。生物系统是复杂的、开放式的非平衡系统。非平衡热力学最根本的一点就是把系统总熵变 dS,看成由与环境交换能量、物质或信息的负熵变流 dS_e和系统内不可逆性引起的熵增量 dS_i组成,即 $dS=dS_e+dS_i$。生物熵不同于孤立系统的熵,由于引入负熵流 dS_e,总熵变 dS 也可以减少,即 $dS<0$,形成有序结构,普利高津(Porigogine)称之为非平衡态的耗散结构。

生物动力学 biodynamics 研究生物体或系统的结构与功能及其有机联系的内在规律的学科,是探索生命现象本质的重要基础之一。生物动力学行为与机制的本质是物质与结构及其相互作用。由于生命系统是一个开放的复杂系统,涉及生物体与环境及生物个体的多个层次,因而其研究内容非常广泛,如作为分子生物学和结构生物学基础的分子动力学,生物膜动力学,膜离子通道动力学,细胞动力学,生物流变动力学,肺呼吸动力学,神经系统和感受器信息过程的动力学及各类生理功能系统动力学等。

生物能量学 bioenergetics 研究生物系统能量的转换与利用及其与生物功能关系的学科。能量是生命所必需的。如生物膜的物质输运,细胞膜的离子泵功能,神经冲动的传递,细胞与机体的生长发育,保持机体温度的热的产生,机体组织和器官运动,生物发光及放电等均需能量。植物以光为能源,从空气和土壤中吸收碳、氢、氧和氮等无机物质,靠光合作用制造糖类、脂肪、蛋白质等有机物质。动物由食

物中摄取的有机物质提供能量,糖类和脂肪是动物的主要能源。太阳是生命的主要能源。生物能量都要通过分子能量转换系统来实现。生命系统中普通的能量载体是三磷酸腺苷ATP等多类磷酸化合物,ATP的偶联反应和水解反应的能量转换分子机制是研究的中心问题。

生物数学 biomathematics 又名数学生物学,是用数学,计算机技术和定量理论研究生物系统和生命过程的学科。正是数学和物理学的渗透,使生物学向定量化和精确科学发展。最早引入生物学的是数理统计和概率论及逻辑模型。现在,数学方程和微分方程为生物系统和生命活动提供模型,以阐明物理化学过程,计算机使模型的计算成为现实,如蛋白质折叠的计算和计算神经科学等。物理模型通常模拟功能特性,而数学模型则为真实系统的高度抽象。生物控制论和信息论使数学在生命科学技术中大有用武之地。非平衡态热力学与统计物理及非线性科学的跨学科发展已成为生物数学的重要内容。目前,人类基因组图谱已公布于世,如何读懂这浩繁的"天书",就需要用数学、逻辑学和物理学加以研究。

蛋白质折叠 protein fold 是指蛋白质如何由多肽折叠成为一定的空间结构的问题。目前对于编码的基因翻译成氨基酸序列的过程已基本清楚,但是以一维信息如何获得三维结构还基本不甚了解,这是分子生物学尚未解决的基本问题之一。目前,蛋白质折叠研究的主要问题为:①蛋白质折叠的热力学与动力学控制;②辨识折叠过程;③折叠的催化物——"分子伴侣(molecular chaperone)";④折叠的启动等。当前的研究多数还是体外实验和计算机数值模拟。如何更进一步研究活体内的折叠过程还有待体外实验积累和新思想的出现。

基因组 genome 或称基因组序列,是包含结构和功能特征的染色体上的全部基因序列。人类基因组研究计划(简称HGP)是世界范围的研究计划。它的目标是分析人类基因组的结构及核苷酸顺序,确定全部人类基因(估计5万至10万个)在染色体上的位置及各DNA片段的功能,对基因组作图,并确定人类基因组中全部(约30亿个)碱基对(简称bp)的顺序,还要研究模式有机体的DNA序列。Britten和Kohne(1968年)指出:"真核细胞的基因组含有重复序列。"真核细胞基因组比原核细胞基因组有复杂得多的不同的结构特征。它的复杂序列可分为三大类:单拷贝或低度重复DNA,中等重复DNA(或rRNA和tRNA),高度重复DNA序列,并有基因不连续性。一些相关的基因在染色体上排列是有序的,构成一个小"家族"或基因群,某些突变点集中在特定的染色体区段。某些DNA序列可以重新编组,以用于调节基因表达或构建新的基因(Lewin,1987)。自1952年,诺贝尔奖获得者麦克林托克(McClintock)发现"转座子"以来,人们相信可移动的DNA序列可能是生物界的普遍现象。它们具有在发育,分化过程中对基因的控制作用;在生物演化中遗传信息的横向流动;在癌基因激活与过量表达中起作用。位于DNA上的各种调控元件的DNA顺序是多样的,这是基因表达调控的多样性和精确性的基础。

二、分子生物物理学
Molecular Biophysics

分子生物物理学 molecular biophysics 用物理和化学的理论与技术在分子水平研究生命物质的结构与功能的学科,它是生物物理中最基本、最重要的一个分支。自20世纪50年代X射线衍射晶体分析方法用于核酸和蛋白质研究获得成功,从而奠定分子生物学发展的基础,至今已有40余年的历史。研究内容包括生物大分子的构象、形状、结构,构象变化的动态特点,分子间的相互作用、能量转换和功能调节等以及测定生物大分子构象与功能的现代物理方法等。当前研究的前沿有生物大分子晶体结构分析、生物大分子溶液构象、分子动力学、分子识别及蛋白质折叠等。

分子生物学 molecular biology 研究生物大分子的化学和物理性质及结构与功能的生物学分支学科。1953年沃森(Watson)和克里克(Crick)提出DNA双螺旋结构及之后不久克里

克提出 DNA“中心法则”，开创了分子生物学的新纪元。20 世纪 60 年代许多科学家为破译核苷酸与蛋白质之间的关系的努力，导致 1967 年“遗传密码字典”的问世，成为分子遗传学的一个里程碑。1977 年桑格(Sanger)弄清了噬菌体 ϕ×174 的全部碱基序列，确立了 DNA 序列分析的新战略和新方法，从而使分子生物学跨入了又一个崭新的阶段。分子生物学以研究生物大分子的物性来揭示生命的本质，促进了生物学各个学科的分子基础的研究，它已成为生命科学的带头学科，全面地改变了生物学的面貌，并促使近 10 年来一个新的前沿学科——结构生物学的形成。

结构生物学 structural biology 主要用物理学方法，配合生物化学和分子生物学方法研究生物大分子结构与功能的新学科，它已成为分子生物学中最精确和最有成效的一个分支。各个层次的生命活动，都需要在分子水平上进行物质结构和功能的研究才能最终阐明其本质。近年来结构生物学的发展，一直在影响着生物物理学的面貌。当前研究的主要内容为蛋白质及其受体、酶蛋白、通道蛋白以及与基因调控密切相关的核酸结合等的结构与功能，主要研究手段有 X 射线晶体衍射分析、核磁共振、电子晶体学、电镜三维重组、中子衍射及各种光谱技术等。

生物大分子 biomacromolecule; biological macromolecules 是构成生命体和生命活动的基础物质，共有 4 类，其中 3 类是聚合物，即有较小分子组成的长序列，包括蛋白质(氨基酸的多聚体)、核酸(核苷酸的多聚体)和糖类(含多羟基醛类或酮类化合物)，第 4 类是脂类。生物大分子具有复杂性和稳定性，分子量巨大，在生命体内，生物大分子的许多功能都发生于它们的构象。许多不同的生物分子参与各种复杂的生物学反应，这种活动高度精确和统一，包含复杂的调控，例如 DNA 序列的“遗传密码”精确地决定了蛋白质的氨基酸序列，基因表达中的分子识别及其调控。生物大分子的物化性质、结构及其动态特性、分子间相互作用及其协同性等正是复杂生命活动的基础。研究生物大分子，是探索生命本质的重要途径之一。

生物分子的相互作用 interaction of biomacromolecules 是指生物分子内原子之间和分子之间的相互作用，可以概括为二类：强相互作用和弱相互作用。前者是指原子间由共价键相互作用而结成分子，它决定了原子之间或分子中相应残基的排序，是蛋白质和核酸等生物分子的一级结构的基础；后者则是一种次级键的作用，包括库仑力、电极化力、氢键、二硫键、盐键、疏水键及范德瓦尔斯(Van der Waals)引力等众多次级键的相互作用，决定了生物大分子的更高级结构的稳定性及其构象的运动性。

生物分子的动态特性 dynamic behavio(u)r of biomacromolecule 即生物分子结构的动态特性，是生物分子结构所具有的扰性和涨落性质，是生物分子完成活性功能的必要条件。这种特性表现为在不同的环境(如温度、溶剂成分及 pH 等)下，构象的变化和调节，如多肽链的螺旋卷曲转换、蛋白质的可逆折叠及核苷酸的堆积排列变化等，其发生源于电子、原子及分子之间的相互作用。它是分子动力学的主要研究内容。

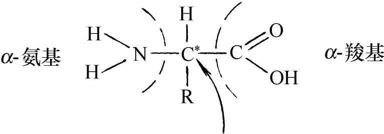
生物分子结构 biomacromolecule structure 生物大分子由原子、原子基团或某些组分组成特定的空间结构，可分为一级、二级、三级及四级结构四个层次。一级结构：仅用化学键(共价键)表示原子间的相互关系的小分子片段；二级结构：原子(或离子)基团(如氨基酸、糖基、碱基等)由肽键、氢键、磷酸二酯键等键连接成局部的结构单元(如 DNA 双螺旋体，α 螺旋及 β-折叠多肽链等)；三级结构：单一结构单元的多聚体三维空间结构，即构象，如 DNA 序列、RNA 碱基堆积、蛋白质和酶的多肽链大分子团；四级结构：由三级结构的蛋白质各种亚基聚合成大分子，或由蛋白质、DNA 等各种生物大分子组装而成的复杂配体，如病毒大分子即为病毒 DNA 和蛋白壳体的装配体，胰岛素四级结构由两个以上的分子量为 6000D 或 12 000D 的亚基聚合而成。

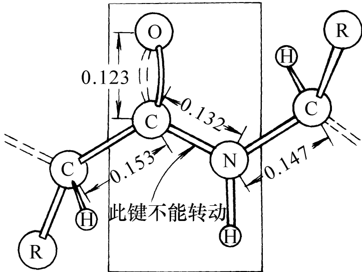
生物分子构象 biomacromolecule conformation 是各原子(或离子)基团绕单键旋转时所

产生的各种立体结构，即三级结构的同义语。这些基团的空间位置的改变并不涉及共价键的破裂，即构型的改变。例如某种蛋白质多肽链仅有某一种构形（如 L 型氨基酸），由于各基团绕单键旋转却可能形成无限多的构象。生物分子空间构象是其完成特定生物功能的基础。

生物分子构型 biomacromolecule configuration 指在立体异构体中取代原子或基团以共价键相连时，它们在空间中的取向。一个碳原子和四个不同的基团相连时，只能有二种不同的空间取向，没有共价键的破裂，这二种构型是不能改变的。例如 L 型氨基酸不经过共价键破裂是不会变成 D 型氨基酸的。

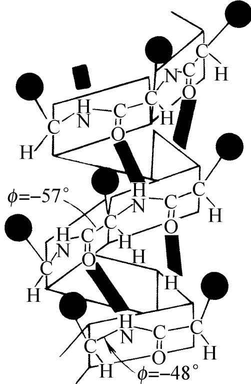
氨基酸 amino acid 氨基酸是构成蛋白质的基本单位。它含有酸性的羧基（COOH）、碱性的氨基（H_2N）、α-碳原子（不对称 C 原子）和叫作残基的侧链 R。α-氨基酸的通用结构如下图所示；天然氨基酸主要是 α-氨基酸。C 原子的 4 个基团组成二种构型，L-氨基酸和 D-氨基酸。自然界中 L 型是主要形式。不同的残基决定不同的氨基酸。蛋白质由二十多种氨基酸构成。氨基酸按电作用分成中性、酸性和碱性三类。一个氨基酸的羧基与另一个氨基酸的氨基共价缩合去掉一个水分子便构成一个肽键（—CO—NH—）即为单肽链。



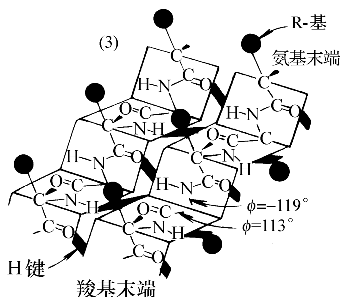


蛋白质分子 protein molecule 由单肽链聚合成的多肽链。它可由次级键作用形成 α-螺旋、β-折叠及无规卷曲等多种复杂的空间结构。蛋白质分子量巨大，约在 10^3～10^{12}道尔顿之间，具有旋光、UV 吸收光学性质、电学性质和两性本质，并有特异的颜色反应。中性盐、醇、酸、重金属盐和生物碱试剂，在一定条件下能使蛋白质沉淀。各种化学和物理因素均可能破坏氢键及其他弱键而导致蛋白质失去活性。重要的结合蛋白质有糖蛋白、脂蛋白、色蛋白和核蛋白。蛋白质由细胞内的核糖蛋白体按照核酸上 DNA 序列的“遗传密码”翻译制造出来。蛋白质是一切生命体必不可少的物质组分之一，人体中约有 19% 是蛋白质，它具有多种生物功能，是生命活动的重要基础物质。

α-螺旋 α-helix; alpha helix; α-spirillum 是蛋白质分子的主要肽链，此外尚有 γ-和 π-螺旋，都比较不重要。20 世纪 30 年代，L. Pauling 等用 X 射线衍射技术发现了肽链折叠 α-螺旋。α-螺旋的主链骨架为锯齿状肽链，链中的 C═O 和 N—H 基团同处一个平面并分处于主链两侧，其中 O 和 H 连成氢键维系螺旋结构。每隔 3.6 个氨基酸残基螺旋上升一圈，螺旋距为 0.54nm。α-螺旋有左旋和右旋，右旋比左旋较稳定。自然界中仅存在右旋 α-螺旋。下图为 α-螺旋的一种表示法。弯曲的 α-螺旋在某些情况下也可伸展、恢复。α-螺旋蛋白质存在于血红蛋白、肌红蛋白（肌肉纤维主体）、溶菌酶等分子中。



β-折叠 beta pleated sheet 是蛋白质的二级结构单元，它也是 L.Pauling 等人提出的。图示一种表示方法，其中各多肽链边靠边地平行排列，相邻主链骨架之间靠氢键维系，与 C^{α}碳原子相连的侧链交替地位于片层的上方和下方，均与片垂直，两残基间沿螺旋线上升的位移为 0.35nm。β-折叠有二种类型：平行式，所有肽链的 N 末端都在同一侧；反平行式，N 末端按正、反方向交替排列。β-折叠是纤维蛋白的主要形式，在较大的蛋白质分子中，它常处于中心部位，羧肽酶为其中一例。



无规卷曲 random coil 除 α-螺旋和 β-折叠以外的其他无周期性蛋白质二级结构单元。其中 β-转角结构能使肽链改变方向，并将二个二级结构连接起来形成蛋白质天然构象。在蛋白质骨架中有 45% 的氨基酸残基是处于 β-转角结构中。多数蛋白质为 α-螺旋或 β-折叠再加上 β-转角的结构。

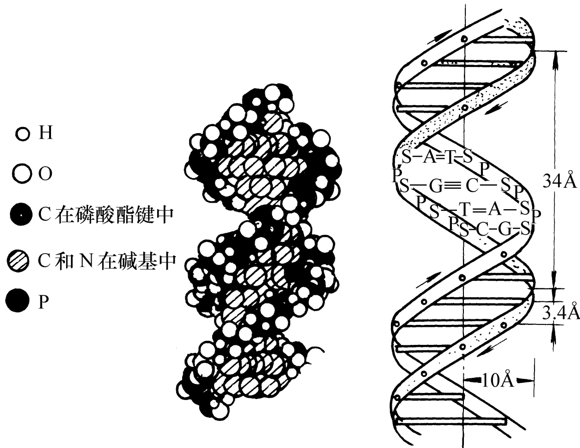
酶 enzyme 是细胞产生的、大都具有催化生化反应功能的蛋白质：单纯蛋白质或结合蛋白质（其中非蛋白部分成为辅基或辅酶）。1982～1983 年，Cech、Atman 和 Pace 三个实验室证实某些 RNA 具有催化活性。目前已鉴定出 2000 种以上的酶，可分为：氧化还原酶、转移酶、水解酶、裂合酶、异构酶和连接酶六大类。目前引起关注的研究有别构酶、诱导酶和固相酶。酶促反应的特点是酶降低反应活化能可促使反应在常温下加快进行，它具有易变性、失活高效率和专一性。其结构基础是酶活性中心，它有结合和催化两种功能，该功能基于酶蛋白分子的构象。Michaelis 和 Menten 杰出的贡献是得出了酶化反应动力学基本规律及其米氏方程。酶作用机制有三种假说：诱导契合假说、锁钥假说及变形（或张力）假说，目前多数人采用诱导契合假说。酶促反应受温度、pH、激活剂和抑制剂的影响。

碱基 base 构成核苷酸的一类离子基团，共有五种：腺嘌呤（adenine，A）、鸟嘌呤（guanine，G）、胞嘧啶（cytosine，C）、胸腺嘧啶（thymine，T）和尿嘧啶（uracil，U）。在脱氧核糖核酸（deoxyribonucleic acid，DNA）中含 A、T、C、G 4 种碱基和 β-D-2′-脱氧呋喃核糖；而在核糖核酸（ribonucleic acid，RNA）中有 A、U、C、G 碱基组和 β-D-呋喃核糖。碱基与糖以糖苷键联结成核苷。碱基平面与糖环平面互相垂直。碱基的电偶极矩约 2～7D，大多不溶于水，并具有吸收紫外光的特性，它总是以氢键联结成 A-T（或 A-U）和 G-C 互补碱基对（bp）的组合构成遗传密码子。

核酸 nucleic acid 由单核苷酸聚合而成的活细胞中最关键的生物大分子，有 DNA 和 RNA 两大类，其组成戊糖不同，碱基则大同小异，DNA 是遗传物质基础，RNA 起遗传信息表达作用，它直接参与蛋白质的合成。一个核苷酸由三部分组成：碱基、核糖和磷酸。碱基与核糖由核苷键联结成核苷，磷酸与核苷以酯键联结成核苷酸，核苷酸之间由磷酸二酯键聚合成核酸长链。核苷酸参与组成某些辅酶和作为生物能载体的二磷酸核苷（ADP）和三磷酸腺苷（ATP）等，而环状核苷酸（如环腺苷酸 cAMP和环-磷酸鸟苷cGMP）是代谢调节中的重要“第二信使”。DNA 的二级结构是两条互补的、反向平行的核苷酸链互相盘绕而成的双螺旋。RNA 基本上是单股分子，仅局部呈双螺旋结构，分子量比 DNA 小得多，存在不大的碱基配对区，有转移 RNA（tRNA）、信使 RNA（mRNA）和核蛋白体 RNA（rRNA）。核酸是高分子量、高黏度、易沉降、等电点低的酸性物质，在波长 260nm 下呈最大紫外吸收。核酸常与蛋白质结合成核蛋白，比较重要的核组蛋白有染色质、核蛋白体和病毒等。

沃森-克里克 DNA 模型 Watson-Crick DNA model J.D.Watson 和 P.H.C.Crick 以及

Wilkins 在 1953 年提出的 DNA 双螺旋结构模型：两条多聚核苷酸链相互反平行盘绕成直径为 2nm 的双螺旋；互补碱基对 A-T、G-C 由氢键联结位于螺旋内部，其平面垂直于螺旋轴，两相邻平面间距为 0.34nm；每 10 个碱基对构成一段完整的右螺旋结构。这是他们通过 X 射线衍射实验，总结分析前人与自己工作的成果，该项研究成果促进生物学进入了发展的新时期。1979 年，美籍华人 Wang 等发现了左旋 Z-DNA（附图引自李建武著，生物化学，1990：85）。



基因 gene　是遗传学的基础概念，又称遗传因子，是主要的遗传物质，其结构是具有遗传效应的 DNA（还有 RNA）片断。由 A、T、C、G 4 种碱基构成的 DNA 和由 A、U、C、G 碱基构成的 RNA 有规则地排列在染色体上构成基因序列，它具有自我复制、转录（mRNA）和翻译（蛋白质）的重要功能。基因按其功能可分为：①结构基因，编码蛋白质而控制遗传性状；②调节基因，编码蛋白质而在表达过程中控制结构基因转录；③没有翻译产物而对蛋白质合成起着重要作用的基因（如 tRNA、rRNA）；④不转录或不完全转录但在遗传过程中起着重要作用的 DNA 片断（如启动区、操纵区、终止区及时态基因等）。据中、美、日、德、法、英等六国科学家和美国塞莱拉公司 2001 年 2 月 12 日联合公布的人类基因组分析表明，人类基因组有 31.647 亿个碱基对，共有 3 万至 3.5 万个基因，比线虫仅多 1 万多个，远少于原先估计的 10 万个基因，与蛋白质合成的有关基因只占整个基因组的 2%。

三、细胞与膜生物物理学
Cell and Membrane Biophysics

细胞生物物理学 cell biophysics　细胞生物物理学是生物物理学的一部分。它用物理学的方法、手段研究细胞的超微结构与功能，细胞的通透性，细胞运动与周期，细胞的通讯与连接，细胞膜的结构与功能等。

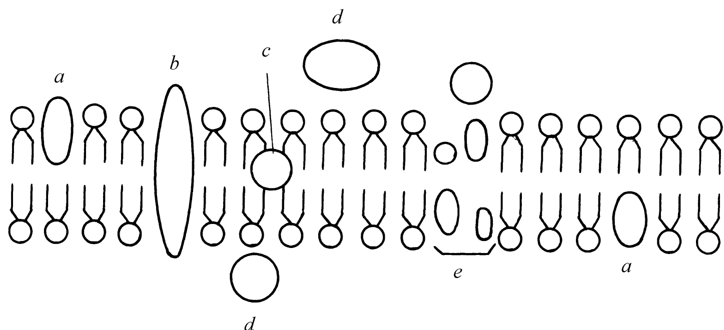
膜生物物理学 membrane biophysics　研究生物膜的结构、特性。主要方法是用生物化学技术（如级差离心）、超声技术、同位素标记等进行分离，然后用电泳、层析等方法纯化，再用电镜、酶标和免疫学等方法进行鉴定；用电镜、小角度 X 射线衍射、瞬时双折射等方法配合使用，可对膜结构进行较精细的分析；用自旋标记、荧光光谱与荧光探剂、圆二向色性等技术测量膜的“流动性”、脂类扩散、蛋白质分子的平动与旋转等动态性质。

细胞 cell 细胞是生命的基本单位。细胞在大小、形状和功能上有很大的差异，但都是具有界限明确的相对独立的小体，且是在所有有机体中的一种普遍的形式。

生物膜 biological membrane 生物膜又称细胞膜，它是一种膜系，它不仅是细胞外的一层界膜，而且在细胞内广泛延伸，包围着和构成了各种细胞器，把细胞内分隔成许多微小的部分。许多生化反应都在膜上或膜内进行。细胞膜可以看作为细胞内两个部分之间或细胞与外环境之间的细微分隔物。它们创造并维持一个一定的化学组成区域，该区域内外环境十分不同，膜不断通过选择性的被动扩散和主动输运（能量耗散）来维持这种状态。细胞膜在细胞内部形成了复杂而庞大的膜系。生物膜不仅是细胞的细微分隔物、细胞的屏障与支架，而且与机体内许多主要功能密切相关，如物质输运、信息交换、能量传输、吸收分泌、兴奋传导都要通过生物膜结构完成；生物电现象，心肌细胞节律性同步搏动，胚胎发育、神经体液调节、药物作用等都依赖于膜结构的完整性；膜结构与机能的异常也与疾病相关联。

单位膜 unit membrane 生物组织经锇酸固定后，在高倍放大率的电镜下，生物膜呈“两暗夹一明”的三层结构，称为单位膜。

膜结构 membrane structure 膜结构是指构成膜的脂类和蛋白质的空间排列。下图中的双层是脂类双分子层，具有很低的通透性，疏水部分的非极性端彼此相对。*a* 是具有疏水与亲水两部分，分别与磷脂的疏水与亲水部分结合的嵌入蛋白；*b* 是横跨脂类双层中的嵌入蛋白；*c* 是分布于脂类双层中的嵌入蛋白；*d* 乃周缘蛋白，它分布于脂类双分子层的表面；*e* 为与嵌入蛋白相连接的周缘蛋白。



细胞膜组成 composition of cell membrane 细胞膜的化学组成主要是脂类和蛋白质，还有糖类，它以糖蛋白和糖脂的形式存在。

液态镶嵌模型 fluid mosaic model 1972 年辛格和尼科尔申提出液态镶嵌模型。认为生物膜是一种流动的、嵌有蛋白质的脂类双分子层结构。膜中的脂类具有很低的通透性，镶嵌于其中的蛋白质具有多种功能。

双分子层脂膜 bilayer lipid membrane 双分子脂层是细胞膜的基本结构，它由两个单层通过碳氢链连接而成，具有明显的界面，可以看作是两个水溶液中夹着一层脂双分子层，脂分子的排列垂直于双相界面，而它们的疏水部分则互相朝向中间。

膜输运 membrane transport 膜输运是生物膜最主要的功能之一，它沟通了细胞内、外环境的联系，选择性地输入细胞需要的物质，运出代谢废物和分泌产物。物质的跨膜输运是生物膜的能量转换、信息传递功能的基础。

膜通透性 membrane permeability 细胞和周围环境进行物质交换的性质，称为细胞的通透性。细胞的环境包括体表的外环境、体内管腔以及周围血液、组织液等内环境。环境中的物质进入细胞，细胞内的物质进入周围环境，都要经过细胞膜。膜通透性的显著特点是选择性，它保证了细胞内生理条件的相对稳定性，保证了细胞内各种生命活动的进行。

被动输运 passive transport 被动输运主要

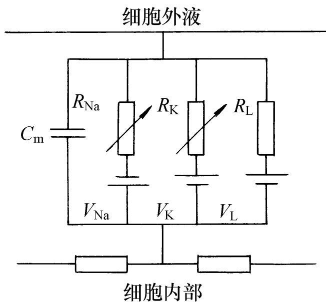
由扩散(电介质和非电介质)、水的输运和促进扩散构成。

主动输运 active transport 主动输运是指物质跨膜逆电化学位梯度的净运动,这种过程要由外界的能量来驱动。主动输运由膜上的蛋白质所介导,因而有很高的特异性。

兴奋 excitation 生物组织有对外界因素的作用发生反应的能力,当作用达到其阈值后,组织发生反应,称为兴奋。

膜等效电路 equivalent circuit of membrane 细胞膜单元的电学性质可以用等效电路来表示,每一个单元由膜电容、钾电池串联钾电阻、钠电池串联钠电阻以及在细胞活动中不起作用或所起作用很小的其他一些离子如氯离子电池串联氯电阻并联构成。当细胞静息时,膜外电位高于膜内电位。

离子通道 ion channel 膜电位的突然降低称为去极化,细胞去极化后对钠、钾离子的渗透性发生变化,并有钠、钾离子穿过细胞膜。这两种离子流可以用药物分别加以阻断,而钠、钾离子穿过细胞膜有其各自的通道,即离子通道。



霍奇金-赫胥黎方程 Hodgkin-Huxley equation 霍奇金-赫胥黎方程是描述膜电位变化、通道电导和跨膜电流密度关系的非线性微分方程:

$$i = C_m \frac{dv}{dt} + (v - V_K)\bar{g}_K n^4 + (v - V_{Na})\bar{g}_{Na} m^3 h + (v - V_L)\bar{g}_L$$

式中 i、v、C_m、$\bar{g}_K$、$\bar{g}_{Na}$ 和 $\bar{g}_L$ 是跨膜电流密度、跨膜电压、膜电容、最大钾电导、最大钠电导和其他离子形成的最大漏电导,V_K、V_{Na} 和 V_L 是相应的平衡电位。式中的 n、m 和 h 都是概率,它们满足微分方程

$$\frac{dn}{dt} = \alpha_n(1 - n)\beta_n n$$

$$\frac{dm}{dt} = \alpha_m(1 - m)\beta_m m$$

和

$$\frac{dh}{dt} = \alpha_h(1 - h)\beta_h h$$

且都是温度、钙离子浓度和膜电位的函数。

突触传递 synapse transmission 兴奋在一个细胞内传播时,通过动作电位引起的局部电流使未兴奋部位兴奋。当兴奋跨越神经细胞传播到它所支配的细胞时,通过两细胞间的部位实现,该部位称为突触,这种传递过程称位突触传递。传播有两种方式:通过释放递质的少量化学物质;通过动作电位形成的电流,它们对应的突触分别称位化学突触和电突触。

四、感官与神经生物物理学
Sensory and Nerve Biophysics

感官与神经生物物理学 biophysics of sense and nerve 是研究感觉器官和神经系统结构与功能的学科。神经系统连同有关的感觉器官在高等动物特别是人体内是高度复杂的信息处理、存贮和决策机构。感官和脑的问题已成为神经生物学注意的中心。主要内容有:①人和动物是如何感知周围世界的;②脑怎样把信息存贮起来,又加以利用;③如何计划并执行其对外环境的行动;④怎样学习过去的经验来改变自己的行为;⑤如何专心于一种感觉而把其他排除在外;⑥思维是如何产生的,怎样作出判断和决策。

感受器 receptors; biosensor 亦称换能器,是环境与神经系统之间的“接口”。其主要功能是将环境所包含的能量与信息转换和编码,产生神经系统能够传输、加工的感觉信息。接受声、光、电、磁、热、力、气味、物味等各种刺激的感受器的结构与功能,尤其是感觉传导机

制，是感觉生物物理学研究的核心。

换能机制 transduce mechanism 指感觉器官把环境的各类物理、化学刺激转换成神经系统电信号的机制。它涉及机械能、光子及各类物质分子结构特征等如何转换为感觉细胞膜电位，传入神经元如何编码成标志各种信号特征的电脉冲序列的过程与机理。

第二信使 second messenger 是换能过程中的一类中间递质（或称内部信使）。其功能是促使感受器分子结构与功能变化，调节离子通道促使感觉细胞膜电位发放，起信号放大作用；在突触传递中参与由递质与受体的相互作用而实现等。例如环鸟苷酸(cGMP)在视杆细胞光电换能中调节离子通道；在嗅纤毛中嗅觉受体分子与离子通道开启、膜电导增加过程中，环腺苷酸(cAMP)起第二信使的作用；听毛细胞换能过程中的第二信使是什么，至今仍不清楚。

感觉传导机制 sensory conducting mechanism 指环境刺激信号的换能、传递与中枢的加工过程及其机理。这包括刺激信号由感受器细胞转变为膜电位的换能作用；由传入神经元转变成电脉冲序列的编码机制，如对光信号，需要表征强度、颜色（频率）饱和度等的编码；中枢神经系统各环节对各类感受物的特征信息的各种比较、抽取、整合及存取直至脑皮层形成感觉的过程与机理。

神经冲动 nerve impulse 即神经细胞接受刺激电流后产生的膜动作电位。神经元静息时的膜电位相对于膜外界质是内负（约 50～100mV）外正，当树突输入刺激电流使膜电位逐渐升高达到某阈值时，细胞膜因离子通道开启去极化而从轴突发放一动作电位（约＋50mV），随后因离子通道失活而复极化，回到静息状态。神经冲动具有的特征为：①膜电位超过阈值才发放；②以“全有”或“全无”的形式发放，脉冲宽度约 1 至数毫秒；③两次发放之间有不应期；④细胞膜内电位增加对树突和离子通道输入有时空整合作用等。对于不同的神经元有不同的脉冲编码特征。

脑电图（波） electroencephalogram EEG 通常指头皮不同点测得的电位变化，通过放大器记录下来，称为脑电图。它是由脑内神经元兴奋辐射的电磁场在头皮各处的分布。除此而外，也可在脑皮层和脑内测得。脑电波分无外刺激时脑的自发电位(EEG)和受环境刺激而产生的事件相关电位(ERP)，亦称诱发电位(EP)。自发电位因不同的生理或病理状态有不同的幅度、频率及其特征，自发脑电波通常幅值在 10～50μV 之间，频率在 0.02～30Hz 之间。脑电图是研究心理工作、感觉和认知等脑活动以及诊断脑疾病的重要物理量。

事件相关（诱发）脑电位 event-related brain potential ERP 与声音、闪光、触击等刺激相应的头皮电位变化，也称诱发电位(evoked potential, EP)。它比自发脑电位 EEG，幅度要小得多，只有几微伏，频率通常在 0.02Hz～40kHz。诱发电位 ERP 有多种，如听觉诱发电位 AEP、视觉诱发电位 VEP、体感诱发电位 SEP 和认知诱发电位 CEP 等。ERP 的潜伏期小于 80ms 的外生分量主要与刺激的物理、化学参数有关；而潜伏期大于 80ms 的内生分量，则取决于心理过程。外生分量可用于寻找脑内产生器和感觉皮层定位及临床诊断与脑有关的神经科疾病；内生分量则可用于脑思维活动的研究。

皮层功率谱密度 cortical power spectrum, CPS 为脑电波 EEG 自相关函数(ACF)的傅里叶变换，是随频率分布的皮层脑电波的功率密度。设 EEG 信号为 $S(t)$，其自相关函数为

$$R(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} S(t)S(t-\tau)\mathrm{d}t$$

则功率谱密度为

$$S(f) = \int_{-\infty}^{\infty} R(\tau)\mathrm{e}^{-i\omega\tau}\mathrm{d}\tau$$

CPS 是表征脑活动的重要物理量。

脑地形图 topographical map of brain 脑电波各频段内功率值用不同颜色表示的球面头皮展成的平面图形。头皮上脑电波频率在 f_1 至 f_2 之间的功率值由功率谱密度 CPS 积分求得，为

$$P(f_1 \sim f_2) = \int_{f_1}^{f_2} S(f)\mathrm{d}f$$

通常各导联内功率值分为5个频段：α、β_1、β_2、θ和δ。

脑地形图是脑功能研究和临床诊断的重要手段。

脑磁图 magnetoencephalogram，MEG 用超导磁强计在头皮上测得的脑磁场并记录在纸上，就是脑磁图MEG。S.J.Williams等(1981年)用超导量子干涉器(SQUID)制成的高灵敏度磁强计测得大脑的磁场在50～500fT范围($1f=10^{-15}$)，是地磁场的10^{-9}～10^{-8}。脑磁场也分自发磁场和受环境刺激诱发的事件相关脑磁场(event-related fields，ERF)，ERF也分为听觉诱发ERF、视觉诱发ERF、体感诱发ERF及认知诱发ERF等。脑磁图对心理工作、语言处理、选择注意、认知处理和意识处理等脑动能研究具有重要的价值。

脑内电磁场产生器 intracephalic generator of electromagnetic field 常用的是电流偶极子源模型。在大脑皮质层(主要是沟、回面)上的一群锥体神经元(功能柱)，在兴奋或抑制时具有一定取向和充分长度的树突放电可能形成有效的电流偶极子，只要面积不太大，可看作一等效偶极子源，它在头皮上形成的电位分布即实验测到的脑电位分布。电磁场是相伴产生的，测得的脑电图EEG与脑磁图MEG正是相互对应的。建立头颅的模型用物理、数学模型作精确计算，可以对脑内发生器定位。这还涉及到多偶极子模型计算和均匀球模型或非均匀球模型及多层头皮模型的计算等。

五、放射生物物理学 *Radiobiophysics*

放射生物物理学 radiobiophysics 是阐明辐射与生物物质相互作用的现象和规律的学科，属于放射生物学中研究原初机理的那一部分。环境的辐射包括宇宙射线、高能辐射、光和各种电磁波等对人类具有损伤或有益的作用，研究其原初过程以及对生物大分子和细胞的作用机制，是研究损伤及其修复、防护及其利用的根据。与辐射相关的自由基的产生及作用也是一个重要环节。

电离辐射 ionizing radiation 引起被作用物电离的高能辐射。一些高能电磁波，如X射线、γ射线(几keV至几千keV)和几乎所有的粒子辐射，都能直接或间接地将被作用物质的轨道电子打出而引起电离。放射生物学涉及的主要是电离辐射。

电磁辐射 electromagnetic radiation 即电磁波辐射。电磁波有两个相互垂直的、分别传递电场和磁场的波，光也是电磁波。电磁辐射能量取决于其波长。具有辐射损伤作用的是短波长的较高能量的电磁波，如X射线、γ射线、紫外线(UV)等。

粒子辐射 particle radiation 是高能粒子的辐射，可以是带电粒子，如α粒子、β粒子、质子、π^-介子和各种重粒子，也可以是电中性粒子，如中子。粒子辐射的能量主要是动能，高能粒子会引起被作用物的电离。

相对生物学效应 relative biological effectiveness，*RBE* 是比较不同的射线产生的生物学效应的一个直观指标，即*RBE*。通常以250keV的X射线为标准，现在也有以^{60}C γ射线作为标准的，其值为：

$$RBE=\frac{\text{标准射线(X,γ)产生某效应的剂量}}{\text{待比射线产生同一效应的剂量}}$$

吸收剂量 absorbed dose 国际上用以描述被照射物质实际吸收的放射能量，定义为：$x=\mathrm{d}Q/\mathrm{d}m$，吸收剂量的国际单位是Gy(戈瑞)，1Gy=1J/kg。这一概念适用于任何类型的射线和任何被照物质。更早的时候，吸收剂量曾用的单位是rad，1Gy=100rad。吸收剂量的确定并不容易，涉及射线和被照物质性质两方面。可以借助“照射量”(exposure)换算求得。国际上定义照射量为：$x=\mathrm{d}Q/\mathrm{d}m$，其中$\mathrm{d}Q$为电荷量，对于X射线和γ射线，$\mathrm{d}Q$是当光子在质量为$\mathrm{d}m$的某一体积空气中释放的电子(正、负电子)被完全阻止于空气中时，在空气中形成一种符号的离子总电荷的绝对值。照射量的单位是C/kg，曾用单位是R(伦琴)，$1R=2.58\times10^{-4}$C/kg。对于空气，X射线和γ射线的吸收剂量Gy与照射量C/kg之间换算系数约为1C/kg≈32Gy。对于不同的生物物

质,X 射线和 γ 射线吸收剂量的 Gy 与 C/kg 之间的换算系数在 32～39 之间。

传能线密度 linear energy transfer, *LET* 是表征射线对物质作用能力大小的一个物理量,即 LET,其定义为:带电粒子在单位长度径迹上传递的能量,即 $L = \mathrm{d}E/\mathrm{d}L$。$LET$ 的单位是 keV/μm,这是描述射线“品质”的指标。

分子损伤 molecular Lesion 辐射造成生物大分子结构与功能的破坏,如放射引起的 DNA 的碱基损伤、糖基和氢键的破坏、单链或双链的断裂;DNA 的合成受抑;DNA 之间和 DNA 与蛋白质之间的交联被破坏等。就蛋白质和酶而言,放射可引起结构松散乃至分子断裂、蛋白质分子之间的交联及酶的失活等。放射可引起染色体畸变,小至基因上个别碱基的变化,大者可导致染色体大片段缺失、交换、颠倒、环和微核的形成等。

膜损伤 membrane injury 辐射对生物膜的损伤。辐射可引起膜的流动性和膜上电荷的变化、膜结合酶的失活、膜上蛋白质的肽键断裂、糖链结构变化、膜上受体功能受抑、膜的屏障和间隔作用消失、膜的破裂导致膜内成分外泄等。

细胞损伤 cell damage 辐射引起细胞的损伤效应,包括:细胞分裂延迟、细胞存活影响和细胞死亡。较小剂量辐照会引起细胞有丝分裂指数下降和细胞数目增加变慢等分裂延迟。细胞存活影响可分为亚致死损伤(SLD)和潜在性致死损伤(PLD)。前者是指能为细胞的修复体系所恢复的损伤;后者是指照射后采取特殊措施(如保温等)能够恢复的损伤。较大剂量辐射照会使细胞死亡。零点几到几个 Gy 的照射,会使细胞尚能维持其代谢,但已丧失分裂能力,即生殖死亡;辐射剂量在几十 Gy 以上,则细胞会不经过有丝分裂而直接死亡,即间期死亡。

靶学说 target theory 是揭示射线与生物材料相互作用本质的基础理论之一。主要内容为:①活细胞内存在着对射线特别敏感的区域,即靶,细胞损伤是射线对靶的作用;②光和电离辐射以光子和粒子簇的形式撞击靶,其中 x 次的概率服从泊松(Poisson)统计原则:在体积为 V 的靶模型中为 $P[x] = (VD)^x \mathrm{e}^{-VD}/x!$,式中 D 为单位靶体积内平均击中数,$D = m/V$,m 为辐射在 V 内的击中数;③射线在靶内的能量沉积超过一定值,便会发生“击中”,对不同的生物靶,发生效应所需要的击中数不同。

存活概率 survival probability 指靶的存活概率,即个体的存活概率。辐射在靶内发生 0 次击中的概率,为 $P(0) = \mathrm{e}^{-VD}$。设系统内所有个体都是一致的,则群体的存活概率便是个体的存活概率,为 $S = \mathrm{e}^{-VD}$。

氧效应 oxygen effect 是指氧的存在增加辐射损伤的效应。它由 Thoady 和 Read 发现,不少生物体系都存在。衡量氧效应的指标是氧增比(oxygen enhancement ratio, OER),为:

$$OER = \frac{\text{乏氧条件下达到某一效应所需的剂量}}{\text{氧存在时达到同样的效应所需的剂量}}$$

氧效应的机理,主要是由于过氧化物靶自由基的形成,这种自由基很难修复。由于氧和电子有很强的亲和力,可以俘获靶分子电离的电子而抑制回复过程。氧效应与辐射传能线密度 LET 关系密切。氧有时并不增强辐射损伤,如对一系列酶有保护作用;氧也可以清除自由基,一种流行的看法是氧具有增敏和防护的双重功能。

自由基 free radical 是指独立存在的有一个或几个不配对电子的原子(离子)或基团,如氢自由基H·;活性氧自由基:超氧阴离子$O_2^{\bar{\cdot}}$、羟自由基OH·、脂自由基L·、脂类过氧化物自由基LO·和LOO·等。自由基(或非自由基活性氧)是体内正常的代谢和外界物理化学因素(如药物、射线等)作用与机体的应激反应的产物。自由基参与很多正常代谢过程,对机体是有益的,如杀灭入侵细菌,前列腺素的合成等。但过量自由基(或活性氧)也能对机体形成各种损害,很多疾病,如心脑血管疾病、肝病、化学中毒、肿瘤及衰老等,其病理和生理进程都与自由基有密切的关系。研究自由基作用机理及其应用的自由基生物学和医学是近年来发展迅速的新兴分支学科。

放射防护 radiation protection; radioprotection 指减轻放射损伤的作用和机理。目前主

要研究和应用的是能中止放射反应链中任一环节的药物——放射防护剂，已报道有7000多种防护剂，包括维生素、激素、氰化物、氨基类化合物，代谢抑制剂，氨基酸等。最有代表性的是硫醇类化合物，此外，细胞内源性成分也起防护作用。衡量药物保护作用的指标是剂量降低系数 DRF(dose reduction factor)，为

$$DRF=\frac{\text{加入保护剂后达到同样效应所需剂量}}{\text{未加防护剂时达到某一效应所需剂量}}$$

涉及防护的机理有几十种学说，主要有：自由基清除机理、氢原子供给机理、混合二硫键机理、缺氧机理、能量转移机理及与细胞生理生化代谢有关的机理等。

放射增敏剂 radiosensitizer　是指单独使用不杀伤细胞，只有与射线共同使用时才提高射线杀伤作用的药物。放射增敏剂的能力用增敏比 SER(sensitivity enhancement ratio)表示，为

$$SER=\frac{\text{不用增敏剂时达到某一效应的放射剂量}}{\text{使用增敏剂时达到同样效应的放射剂量}}$$

在作增敏剂的横向比较时，还用到另一个量—c1.6，是指增敏比为1.6时的增敏剂浓度。可列入增敏剂的有：BSO(D，L-丁硫氨酸-S，R-亚砜基亚胺)和DEM(顺丁烯二乙脂)、PNAP(双硝基苯乙酮)等。

六、光生物物理
Photobiophysics

光生物物理 photobiophysics　是研究光对生物作用的光物理与原初光化学过程的学科。它包括发光团的吸收、激发和激发态及其弛豫过程；荧光与磷光的发射与衰减；光能量的吸收、传递及陷获；各种光产物(如光生电子、质子、自由基与单线态氧等)及瞬变产物的生成及其特性等内容。

辐射弛豫 radiation relaxation　分子从能量较高的激发态通过弛豫过程回到基态并发射光子的衰变过程。辐射弛豫包括二种过程：荧光(fluorescence)和磷光(phosphorescence)。当一个分子从其最低单线激发态(S_1)自发地发射光子回到基态(S_0)，即 $S_1 \rightarrow S_0$，此辐射弛豫称荧光，它常发生在激发后的 $10^{-8} \sim 10^{-9}$s；若一个分子从最低三重态(T_1)自发的发射光子回到基态，即 $T_1 \rightarrow S_0$，此辐射弛豫过程称磷光。磷光的波长比荧光的要长。

生色团 chromophore　能吸收光的物质分子或基团，即光感受体。如主要感受紫外光的蛋白质、核酸、糠香豆素类物质；感受紫光～黄光的视紫质、嗜盐菌紫膜与菌紫质；感受红外光～远红外光的光敏色素；感受红光的完成光合作用的叶绿素以及蓝光受体隐花色素等，其中多为蛋白质复合体，它们可将光能转化成化学能，或者吸收光子引起生物大分子能量提高而成为激发态。

溶剂效应 solvent effect　是指溶剂与发光团的相互作用对荧光的影响，主要为荧光团的荧光光谱的位移。当分子接受光子由基态跃迁至激发态时，可产生相当大的几何构型与分子中电荷分布变化，并引起溶剂以及溶剂分子中的电子重新分布，这种发光团与溶剂之间的相互作用会影响激发态与基态之间的能量差，从而导致荧光光谱的位移。发光团与溶剂分子间的特殊化学作用，会产生特殊的溶剂效应，产生的光谱位移将更大。

猝灭效应 quenching effect　是溶质与发光团的相互作用引起荧光的猝灭。当荧光团的荧光光谱与溶质的吸收光谱有重叠时，受激荧光团通过非辐射共振转移将能量转移给溶质分子而引起荧光猝灭；受激荧光团与溶质碰撞而转移能量，引起碰撞猝灭(dynamic quenching)；当溶质与受激荧光团形成络合物时，还会产生静态猝灭(static quenching)。利用荧光猝灭效应恰好可以作为检测荧光物质的荧光探针。

光异构化作用 photo-isomerization　是当生色团吸收光子后发生的分子构型变化。例如，在视紫质漂白过程中的原初光化反应就有异构化。实验证明，视蛋白吸收光后将能量转移给视黄醛，使11－顺型视紫质转变为全反型视紫质，视黄醛已发生了异构化，它们经历的时间是 10^{-9}s，并导致一系列的暗反应。这种反应还可以是可逆的。视紫质的光异构化作用是视觉形成中产生光感受器电位的前期光化

学过程。

光敏化作用 photosensitization 即光动力作用(photodynamics),是指任一化学或生物学反应,在可见光照射下,必须有一敏化剂参与光吸收才能发生,并需要氧的参与。光动力作用物质称基质,它们都是蛋白质、酶与核酸等。蛋白质和酶中的敏感组分都是含硫氨基酸和芳香氨基酸,核酸中的敏感组分是鸟嘌呤。光动力作用使生物膜脂的脂肪酸氧化,从而使膜变得脆弱,光氧化作用包括单线态氧的氧化、自由基的氧化与电子转移的氧化,这些对膜和细胞必然产生破坏作用。最有效的敏化剂是那些三重态寿命较长而量子效率又高的物质。如染料(甲烯蓝、玫瑰红与曙红等),色素类(叶绿素、卟啉与黄素等),芳香碳氢化合物(红烯、一些蒽类化合物)等。

蛋白质发光 proteinic luminescence 蛋白质吸收280nm左右的紫外光,可引起激发态并有发光。发光的蛋白质主要是苯丙氨酸(荧光峰位282nm)、酪氨酸(303nm)及色氨酸(348nm)这三种芳香氨基酸。这些氨基酸可用作蛋白质荧光的内在探针。蛋白质的结构对其荧光有很大影响,测量荧光谱可鉴别蛋白质结构。蛋白质也可以发磷光,因而磷光也可用来研究蛋白质构象与动力学。蛋白质磷光主要由色氨酸与酪氨酸贡献。

核酸发光 luminescence of nucleic acid 核酸吸收紫外线会发光,但其荧光量子效率很低,可能是因内转换损失了能量的缘故。核酸在室温下的荧光光谱比低温(77K)时加宽,无结构并失去红移。同一碱基的核苷与核苷酸的荧光谱轮廓十分相似。所有嘧啶碱基的衍生物的荧光量子效率均为同一数量级,而嘌呤衍生物的荧光量子效率比嘧啶衍生物的都较小。核酸的三重态在低温时很易观察到,但在室温下不行。核酸碱基荧光不能作为内在探针,核酸的研究只能依靠荧光和磷光的外在探针。

光合作用 photosynthesis 是光转化为化学能的典型光能转换。其光物理过程为:任一辅助色素(天线色素、叶绿素与脱辅基蛋白质复合物)吸收光能后跃迁至激发态,通过非辐射弛豫将能量转移给叶绿素分子,最后传递到由特殊状态的叶绿素分子和电子供体与电子受体组成的反应中心,该中心就发生电荷分离,随后继发一系列氧化还原反应,完成水的光解和CO_2的还原,将ADP转变成ATP,则光能转换成生物体可利用的化学能。

生物发光 bioluminescence 是生物发生光子的过程,可分为发出可见光的生物发光,即强发光(强度可达10^{10}光子$cm^{-2}s^{-1}$)和肉眼觉察不到的超微弱发光,即生物光子现象(强度仅10^3~10^4光子$cm^{-2}s^{-1}$),又称化学发光。生物发光(强发光)中,能量是由氧化作用或氧的反应释放提供的,主要的发光体是活性氧$^1O_2$和激发态羰基;而生物光子,则需以日光或其他辐射为能源,发光体有自由基、基团正、负离子的湮灭,获得转移能的卟啉与芳香化合物等。生物光子已应用于医学和农业,可作为反映病理与生理状况的检测指标。

激光生物效应 biological effect of laser 激光作用于生物体,主要引起热、压力、光和电磁场四种效应。激光的生物效应可作用于生物体不同层次:①超短脉冲激光作用于蛋白质可引发光生化反应,改变酶的活性、定向催化而不损伤活细胞;②氩离子激光可损伤染色体,红宝石激光会抑制DNA表达;前苏联学者Н.Ф.Гамалея提出弱激光可调节蛋白质合成;③激光可引起胶凝,破坏细胞核,损伤线粒体;而前苏联学者А.А.Профончуков提出,氦氖激光被膜受体吸收后可使细胞光致敏化,产生活化效应,提高蛋白质合成系统活性,增加有丝分裂;④氦氖激光和脉冲红宝石激光对某些细菌生长有影响:能量小时有促进作用,能量大时有抑制作用;⑤红宝石激光弱强度照射可提高白细胞噬菌功能,CO_2激光辐照腰间穴位使细胞数增加等。激光的生物效应及其机理有待研究。目前已应用于医学的有激光治疗肿瘤、治疗眼疾病、治疗动脉血栓、血管成形、激光吻合术、激光外科整形等。

七、生物组织的物理特性
Physical Characteristics of Biological Tissue

生物电学 electrobiology 是研究生物电学特性和电对生物作用的学科，是了解生命现象和认识生命活动规律的重要内容，同时，对发展医学和农业也有重要的作用。电现象和电活动在生命过程中几乎无处不在。例如生物体内的离子、离子基团、分子片段均可带电或有电偶极矩，有些蛋白质大分子整体成电中性，但却有很大的电偶极矩；形成生物分子复杂结构与功能的基本作用是电相互作用；生物体内各种生化反应离不开电活动；细胞和生物膜活性的基础是电活动；各类感受器细胞将热、光、声、力各种刺激转换成膜电位；神经细胞、突触和神经传递电脉冲，脑皮层兴奋产生电磁场；心电、肌电、皮肤电、胃电等均是电活动。某些鱼类通信是接受和辐射电磁场。在研究生物和人的正常生理、生化、遗传、病理、药理、医学诊断和治疗等的各学科中，都涉及到生物电和电对生物的作用。

生物磁学 biomagnetism 是研究生物磁特性和磁场对生物的作用的学科，是探索生命现象和本质的重要方面。生物磁学真正成为一门学科是在20世纪60年代后，由于磁学及其技术的发展，出现了超导量子干涉器（SQUID）高灵敏度磁检测仪和核磁共振、顺磁共振及穆斯堡尔等仪器，研究微观结构电磁现象推动了生物磁学的发展。各个层次的生物组织具有磁特性。多数生物大分子（如DNA和某些酶）具有各向异性的抗磁性，少数为顺磁性（如某些蛋白质、酶和自由基），只有极少数具有铁磁性。生物组织的磁场由生物电流引起，如心磁场、脑磁场。肺磁场则由外源性铁磁物质浸入而产生。某些鸟类、昆虫、微生物、细菌、植物种子中存在磁性物质。生物磁学的研究和技术，已渗透到结构生物学、生理学、病理学及药理学等各个学科领域，它在医药学、农业、生物工程等领域的应用范围正在不断扩大。

生物力学 biomechanics 是研究生物体中力学原理的学科。从生物大分子、细胞、组织到生物机体的各个层次的生命过程中，都有各种形式的力学问题。生物力学研究内容十分广泛，它包括生物材料的力学性质、运动力学、人体力学、植物力学、细胞力学等。涉及动物的运动，血液循环的动力学，肺的表面张力；树液的提升，气孔的张开，细胞的分裂等。生物力学也是生物医学工程学和仿生学的基础之一。

生物流变学 biorheology 是研究生物物质的变形与流动特性的学科，其基础理论是流体力学、弹性力学和电学等。研究内容有：血液的流动性，眼球状晶体的变形，以及淋巴液、关节液、脑脊液、玻璃体液、子宫颈黏液、支气管分泌物、肌肉、心脏、膀胱、其他软组织、软骨、骨骼等流变学及蛋白质和核酸的流变学等。目前研究最深入的是血液流变学（hemorheology）。生物流变学与医学和生物学关系密切，是现代医学和理工学科交叉的一门边缘学科。

生物组织色散 dissipation of biological tissue 是生物组织的介电色散，在脂肪、皮肤、肌肉、血细胞、肝、微生物等组织中都能观测到。典型的生物结构色散特征曲线 $\ln Z$（或 $\log\varepsilon$）～$\log f$，有 α、β、γ 三类色散，分别反映三类结构或功能的耗散特征。不同的生物组织，特征频率不同，例如在肌肉组织中，三色散峰的特征频率为：$\alpha\approx10^{2}$Hz，$\beta\approx10^{6}$Hz，$\gamma\approx2\times10^{10}$Hz，它们可能表征了细胞膜、大分子、小分子等不同层次的耗散特征。生物组织中存在各种离子、离子基团而成为较大的偶极矩，在交变外电场中，发生趋向极化并跟随外场运动，由于结构差异产生不同的热耗散弛豫。介质的介电常数 $\varepsilon=\varepsilon'-j\varepsilon''$ 具有复数特征，虚部 ε'' 表征介质耗散部分，ε 并随频率的提高而降低，偶极矩趋向弛豫时间与外场频率相应时具有最大热耗散，并伴有构象跃迁。

电流的生物效应 biological effect of electric current 指生物组织具有的被动电特性和介电性质及对外电流的反应很复杂。外加直流或低频电流在机体内的分布受到生物组织结构阻抗特性的制约，高频电流则受介电特性的影响。直流或低频电流主要呈电阻行为，导致

物理与电化学性质的效应，主要是焦耳热效应。该电阻多呈非线性特征，大电流会导致组织损伤，弱电流的电化学效应导致电解质平衡分布变化而影响各种生命活动过程。高频电流的效应则主要表现为电容性质，即介电热耗散效应，并会伴随有多种代谢活动变化。适当的频率和强度的电流生物效应，具有临床应用意义。

磁场的生物效应 biological effect of magnetic field 研究磁场生物效应的领域也称为磁生物学。其中包括地磁场和人工磁场对生物的作用。地磁场强度较弱，小于 80A/m(≈1Oe)。生物定向是地磁场作用的事例之一。澳大利亚指南白蚁会定向筑巢，鲨鱼通过自身产生的电场对地磁场定向，Blakemore(1981 年)发现螺旋菌能准确地游向北磁极方向，鸟类根据磁场和重力场定向。K.V.Frisch 对蜜蜂的舞蹈“语言”和地磁场作用机理的精心研究，在 1973 年获得了诺贝尔奖。大量研究报道表明，一定条件的强磁场会影响生物大分子的构象和功能，会使染色体变异，影响 DNA 复制和蛋白质表达，刺激或抑制细胞生长，旋转磁场可打碎体内结石。磁效应对组织、器官、神经系统乃至整体都有影响。磁场的生物效应研究对生物工程和现代医学具有重要的意义。

微波的生物效应 biological effect of microwave 是高频电磁场对生物的作用，其作用机理主要是介电的热耗散效应。机体内部热量散发，源于对外场频率敏感的大分子介电行为，它可以深入到深部组织中。温度在组织中分布一般达到某种稳定水平。由于生物机体具有温度调节功能，故温度效应伴有多种生理代谢活动的变化，如血流加快、血管透性上升、组织充血、酶活性改变、组织与细胞活动改变、机体协调功能的改变、新陈代谢水平的变化等。过强的微波，会使局部体温上升和机体热平衡的部分破坏，因而发生脱水及心血管功能下降。波长过短(<3cm)的微波，由于水的吸收率高(达 98%)而难于深入机体。微波的生物效应研究是医学治疗的基础。

超声的生物效应 biological effect of supersound 超声对生物不同层次的作用有复杂的效应和机理。超声对溶液中生物大分子尤其是 DNA 作用明显，主要是降解，导致 DNA 断裂，其机理可能是空化作用。强超声可导致细胞膜破裂、膜表面电荷减少或膜通透性变化等。生物组织对超声有相对高的吸收和低的热传导，易引起温度上升，因而可导致血管扩张或收缩、使血压变化。高强度超声聚焦照射可破坏肿瘤细胞或抑制其生长，而适当强度刺激可促进组织生长。超声在生物介质中的能量转换及其弛豫与频率关系密切，并伴有热效应。超声的辐射压和声压作用导致骚动、摩擦效应从而影响生物结构与功能。超声作用引发生化效应可认为是二级作用。超声的机械振动引发超声的生物效应是超声诊断和治疗的基础。

八、生物控制论
Biocybernetics

生物控制论 biocybernetics 控制论的奠基人维纳(N.Wiener)的定义是：“动物和机器中的控制和通讯的科学”。生物控制论把生物对象看成信息处理和控制系统，从综合的、整体的角度，着重研究信息处理过程和控制过程(包括接收、传递、存储、加工及反馈等)。在控制论中，用状态变量和有关参数表征生物系统的功能特性，测量这些特征变量，并研究它们之间的数学关系，建立系统模型与理论。这为揭示生命奥秘提供了新的可能。目前研究内容主要是生物系统分析和神经控制论。生物控制论对生命科学飞跃为精确科学具有重要的意义，是生物物理研究的重要内容之一，也是生物工程、仿生工程及智能工程的重要基础。

生物信息论 biological information theory 是关于生命信息传递与编码的定量理论，着重阐明信息过程及信息与物质载体之间的关系。信息是控制论中最基本的概念之一。维纳认为：“信息意指获得解决问题的知识，……信息本身在时间和空间范围传递着有关过程的知识。”生命信息大致可以分为两大类：基因型信息和记忆型信息。生物大分子存储的基因信息是决定生命体及其活动特征的遗传信息。

最近公布的人类基因有约 31.6 亿碱基对，其信息量约为 1.26×10^{10} 比特(bit)。脑中存储的记忆型信息约为 10^7bit，而允许存储的信息量估计可达 10^{13}bit。生理学家将脑的功能分为思维、记忆、感觉、意志和行为反应等多方面，其中包括了大量复杂的信息过程。信息过程与生命体的物理和化学过程密切关联。目前认为(推测)短期记忆存储在神经网络中，而长期记忆存储在生物大分子结构中。

生物系统 biosystem 是由相互作用着的部分(元素)构成的具有一定功能的整体。系统包括三要素：构成系统的一群元素、由元素构成的研究目标以及与系统联系的环境。生物有分子、细胞、器官等不同层次，系统具有相对性。Ashby 表述系统为：可测定的一组变量或称状态向量 $x(t)$，他们表征系统功能特性，也称特征变量。对于确定的变量 $x(t)$、$x(t_0)$ 和输入 $u(t)$、$u(t_0)$ 及输出 $y(t)$，则系统有状态方程：$x(t)=P[x(t_0),u(t_0),t]$；其外部表述为输出(观察)方程：$y(t)=h[x(t),u(t)]$，t_0 为 t 的前一时刻。由状态向量 $x(t)$ 构成的空间就称为状态空间或相空间。

系统模型 systematic model 两个物体之间具有相似性，其中一个称为原型，则另一个为模型，模型与原型具有相似性。在生物控制论中，“相似性”主要指控制和处理信息的行为和功能特性，通常把具有复杂生物系统相似功能的物理或数学表述称为模型。模型与原型的结构可有某种相同，也可毫不相同。一种内部结构、特性及其相互联系完全清楚的系统称为“白箱”系统，其数学模型即理论模型。某种系统内部结构一无所知或不十分清楚，但能用数学表述其外部特性，则称为“黑箱”模型。严格地说，生物系统不可能是真正的白箱系统。少数较简单的生物学系统确已建立起成功的理论模型，如半规管和耳蜗模型。

生物反馈控制系统 biofeedback control system 指具有反馈控制功能的生物系统。一个控制系统由三部分构成：控制装置、执行装置和受控对象。控制装置接受信源而产生控制信号，执行装置按控制信号调控对象，该对象改变状态并输出受控量。当受控量反过来作为信源作用于控制装置，系统为反馈系统。生物系统是非常复杂而功能完美的自动控制系统，具有各式反馈。如 DNA 复制的自我调控、哺乳动物(如猫)的平衡控制系统和体温调节系统、肺呼吸节律控制系统、中枢神经控制系统、植物神经控制系统、内分泌循环控制系统及免疫控制系统等。许多病理现象与正、负反馈失调有关。如运动员“抽筋”和胃溃疡的一种起因，就是过强的正反馈。

房室分析 atrioventricular analysis 指对系统内物质分布均匀的若干子系统之间和系统与环境之间物质交换的系统数学分析。上述系统称为房室模型，以房室中的物质量或浓度为系统状态变量，则可由一些离散的、齐性的系统作为真实的连续非齐性系统的模型，从而使数学分析大为简化，易于实现数值动态模拟。房室分析对于药物在机体内的吸收、分布、代谢和排泄过程，以及某种物质在生物体内的代谢变化等具有生物学和医学意义。

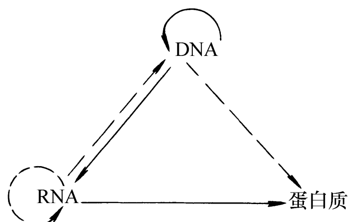
频率特性 frequency characteristic 是表征系统动态功能特性的频域数学模型。系统的频率特性是传递函数，在电路系统控制中亦称网络函数。只要知道了系统的传递函数，对于任何刺激(输入)均可预测系统相应的反应(输出)。对于单一输入和输出的线性定常系统，其状态方程为常系数线性特征方程。由状态方程的拉普拉斯(Laplace)变换的常系数特征方程，可求得系统的传递函数。对系统施以不同的激励信号，由系统响应的频率特性实验曲线也可求得传递函数。频率特性分析是系统辨识的重要方法，如 20 世纪 50 年代以来，对瞳孔系统的数学模型的研究，取得了模型与生物实验结果广泛一致的吻合，阐明了生理学难以解释的虹膜震颤、瞳孔收缩的“大小效应”等，成为生物控制论定量研究的成功典范。

信息熵 information entropy 是信息论中信息量的统计表述。香农(Shannon)定义信息量为：$I=-K\sum_i p_i \ln p_i$，表示信息所消除的不确定性(系统有序程度)的量度，K 为待定常数，p_i 为事件出现的概率，$\sum p_i=1$。对于 N 个等概率事件，$p_i=1/N$，系统的信息量为 I

$=-K\ln p_i=K\ln N$。平衡态时系统热力学函数熵的最大值为 $S=-k\sum_i W_i\ln W_i=k\ln\Omega$，$k$ 为玻尔兹曼常数，$W_i=1/\Omega$ 为系统各状态的概率，$\sum_i W_i=1$，Ω 为系统状态数，熵是无序程度的量度。信息量 I 与熵 S 具有相同的统计意义。设 K 为玻尔兹曼常数 k，则信息量 I 可称信息熵，为 $H=-k\sum_i p_i\ln p_i$，信息给系统带来负熵。如取 $K=1$，对数底取 2，熵的单位为比特(bit)；取底为 e，则称尼特。信息熵是生命系统（作为非平衡系统）在形成有序结构——耗散结构时，所接受的负熵的一部分。

信息维数 information dimension(DI) 是几何形态不均匀程度量的特征，是描述事物分形特征的一种分维数。分维数，指表征事物量的独立实数参数的维数是分数，维数是分数的几何形态总称为分形（fractals）。匈牙利科学家 A. Renyi 定义信息维 D_{I} 为：$D_{\mathrm{I}}=\lim\limits_{\varepsilon\to\infty}\frac{\ln I}{\ln\varepsilon}$，式中 ε 为几何分形测量时，所设定的单位格子（或盒子）边长的刻度数目，$I=\sum p_i\ln(1/p_i)$ 为事物发生的信息量，p_i 是测量器的每个格子（或盒子）被测出的概率，$p_i=C_M^m(1/N)^m((N-1)/N)^{M-m}$，$N$ 为测量器全部单位格子数，M 为被测物小面元（或小体元）的总个数，第 i 个格子（或盒子）中包含 m 个小面元（或小体元）。任何生物物质形态（脏器、蛋白质或 DNA 等）的信息维都可能成为临床鉴别诊断的特征指标，它是近年来形态量化的病因学研究的内容之一。

基因信息 gene information 是存储在由 DNA（少数 RNA）分子片段组成的基因中的生物遗传信息。生物代代相传的正是决定他们的种、类及个体生命性状特征的信息。这些生物性状包括：结构与功能，如形体、外貌、智力、器官基质及其特征、对某些疾病的敏感性、神经系统等；总数超过 10^4 个不同的酶；细胞内的复杂过程；形成化合物的聚合物；先天性本能活动的控制等。基因信息的功能实现主要是通过蛋白质。克里克(Crick)于 1971 年对自己在 1958 年提出的遗传信息传递中心法则做了补充，阐明了信息传递的方向和连续性（如图）。DNA 可自身复制，并可转录成 RNA，以 mRNA 为模板合成蛋白质称为翻译。虚线表示特殊情况下的路线。蛋白质的氨基酸顺序是由基因编码的遗传密码碱基顺序所决定的。近年来的研究指出，蛋白质的活性不单取决于



其氨基酸顺序，而且与其特定的构象的完整性密切相关。因此，可能存在另一种“折叠密码”，它决定多肽链向三维结构的转变。折叠密码是什么？它是如何指导蛋白质折叠？这正是当今关于新生态链折叠研究的关键问题。人类基因有 3～3.5 万条，基因组构成了一本长达 100 万页的浩繁的“天书”，破译它的全部信息还需要一代代的努力。

遗传密码分配

	U	C	A	G	
U	苯丙氨酸	丝氨酸	酪氨酸	半胱氨酸	U
	苯丙	丝	酪	半胱	C
	亮	丝	标点	标点	A
	亮	丝	标点	色	G
C	亮	脯	组	精	U
	亮	脯	组	精	C
	亮	脯	谷－N	精	A
	亮	脯	谷－N	精	G
A	异亮	苏	门冬－N	丝	U
	异亮	苏	门冬－N	丝	C
	异亮	苏	赖	精	A
	甲硫	苏	赖	精	G
G	缬	丙	门冬	甘	U
	缬	丙	门冬	甘	C
	缬	丙	谷	甘	A
	缬	丙	谷	甘	G

神经中枢信息 information of nerve center 是指存储于神经网络中的记忆型信息。它由生命过程的经验积累和连续记忆形成。短期记忆存取时间仅几分之一秒，容易遗忘，信息存贮在脑皮层的网状结构中，称“网络存贮”。短期记忆由于特别专注或有重视意识的观察或经历事件，容易成为长期记忆。知识和经验的积累通过脑活动，形成个体特征的长期记忆，它是后天获得的信息，不能遗传。人脑有约 1.5×10^{11}个神经元由神经和突触构成复杂网络。神经网络和突触传递是思维的物质基础。齐利肯(Zilliken)和阿伯达拉(Abdallah)证明，蛋白质分子影响突触运动，突触电位变化使通路产生固定的相位。永久性记忆基于神经细胞内的化学过程，记忆过程存在一个与心理过程相平行的大分子变化过程。知之甚少的神经网络复杂的信息过程是生物控制论和信息论研究中最重要的课题。

神经网络 neural network(NN) 是由巨量神经元相互连接成的复杂非线性系统。它具有并行处理和分布式存储信息及其整体特性不依赖于其中个别神经元的性质，很难用单个神经元的特性去说明整个神经网络的特性。脑是自然界中最巧妙的控制器和信息处理系统。自 1943 年 McCulloch 和 Pitts 最早尝试建立神经网络模型，至今已有许多模拟脑功能的模型，但距理论模型还很远。大致分两类：①“人工神经网络”，模拟生物神经系统功能，由简单神经元模型构成，以图解决工程技术问题。如模拟脑细胞的感知功能的 BP(Back-Propagation)神经网络；基于自适应共振理论的模拟自动分类识别的 ART(Adaptive Resonance Theory)神经网络等；②“现实性模型”，与神经细胞尽可能一致的神经元模型构成的网络，以图阐明神经网络结构与功能的机理，从而建立脑模型和脑理论。如基于突触和细胞膜电特性的霍泊费尔特(Hopfield)模型，以“计算能量”刻划网络整体的动态行为，可解释联想记忆；Ekeberg 等人(1991)建立的基于 Hodgkin-Huxley 方程的四房室神经元模型等。神经网络研究不仅为阐明脑功能机理，也是发展智能计算机和智能机器的基础。

九、生物物理技术
Biophysical Technology

生物物理技术 biophysical technology 应用于生物物理学研究的各种物理技术。为了研究生命现象的物理和化学过程，通过实验检测分析生物大分子、细胞、器官组织等各个层次的结构与功能，各种先进的物理技术被广泛应用。其中包括 X 射线计算机层析技术、核磁共振波谱、电子顺磁共振、吸收光谱、发射光谱、拉曼光谱、光偏振技术、光干涉与衍射技术、扫描隧道显微镜、CCD 显微摄像技术、基因芯片技术、仿生技术以及与之配套的计算机专用技术等。

Medical Physics
医学物理学

医学物理学 medical physics 医学物理学是运用物理学的理论、方法和技术，研究有生命的对象，并以在医学领域方面的实际应用和理论研究为目的。其中包括热医学、运动医学、激光医学、超声医学、电子医学、磁医学、微波医学、核医学等。它近期发展迅速，其原因之一是科学发展本身的需要，二是物理学自身的特点。生命科学的发展正从宏观走向微观，从定性走向定量，从细胞水平走向分子水平，从手工的、机械的、接触型的测试手段走向自动化、智能化、非接触型的测试手段。而物理学既有系统的定量的理论，又有精密的先进的实验方法，故而在生命科学发展中，它具有重要作用。

一、电子医学
Electro-Medicine

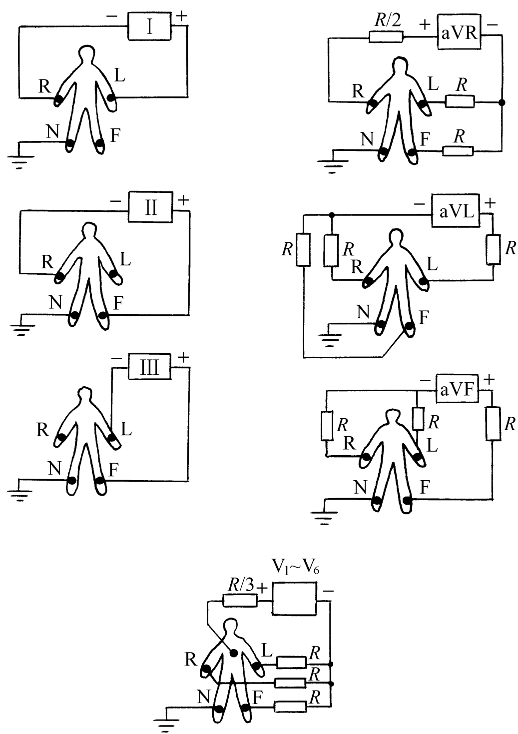
电子医学 electro-medicine 电子医学是生物医学工程领域中发展最早、范围最广的重要分支，它随着新的科学技术的发展，以电子技术为先导，结合自动化技术、计算机技术、信号处理技术、超声、电磁波及射线、材料科学等多种技术科学对有关人体或实验动物的各种生命现象、状态、性质和变量，进行检测和量化，了解生命奥秘、机体结构、生理功能和疾病情况，达到诊断和治疗的目的。其进步依赖于生物医学的发展的需要和现代科学技术成就的应用。

生物医学检测技术的分类方法有很多种，按其检测过程是否直接在生物活体上进行，可分为离体测量和在体测量；按被测量的物理性质，可分为生物电测量（如心电、脑电、肌电、皮肤电、神经电、细胞电、眼电等）和生物非电量测量（如血液动力学参数、呼吸动力学参数和生物化学参量等）。

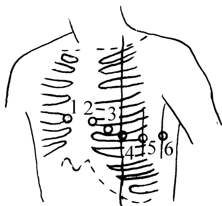
心电图导联 ECG leads 体表心电图测量中，一般使用四只肢体电极[分别置于左手（L）、右手（R）、左足（F）、右足（N）]和六只胸部电极（C1～C6）。不同的导联表示不同方式的电极连接和组合状态。国际标准导联体系的导联方式见表及图（a）。其中威尔逊（Wilson）胸部导联的电极安放位置如图（b）。

体表心电图的导联方式

导联名称	符　号	电极位置与极性	
		+	−
标准肢体导联	Ⅰ	左手（L）	右手（R）
	Ⅱ	左足（F）	右手（R）
	Ⅲ	左足（F）	左手（L）
加压单极肢体导联	aVR	右手（R）	左手（L）和左足（F）
	aVL	左手（L）	右手（R）和左足（F）
	aVF	左足（F）	左手（L）和右手（L）
威尔逊电极胸部导联	V_1～V_6	威尔逊胸部导联位置（图 b）	左手（L），右手（R）和左足（F）



(a)临床常用的导联方式



(b)威尔逊胸导联的电极放置

另外还有 Frank 导联体系，它具有线路简单，能减少由于体形不同所产生的影响、更切合于临床应用的优点，是近十几年来流行的一种“校正的导联体系”，主要用于心向量图中。

心电监护　ECG monitoring　心电监护是病人监护的重要组成部分，能在较长时间内持续监护病人的心电信号，经计算和处理，给出病人心率和心律变化的信息，作出分析与判断，并在必要时发出报警。心电监护能及时发现与处理各种心律失常，尤其是心脏停搏、室颤等，在抢救重危病人中起重要作用。一种应用微型计算机的典型心电监护系统包括信息输入、预处理、模数（A/D）和数模（D/A）转换、QRS 波群检测、心率计算、心律失常判别、趋势图和直方图计算、信息输出装置等部分。

心电图机　electrocardiograph（ECG）　用以获得心电图的装置或仪器。1903 年 Wilhelm Einthoven 用弦线电流计和光学记录方法制成了世界上第一台心电图机。当代微型计算机技术的应用使心电图机向智能化仪器方向发

展，不仅实现了心电图机操作和工作过程的自动化、多通道和多功能，而且能对心电图进行自动分析给出诊断结果。现在还有小型的携带式心电图机以及病人佩带式可长时间连续记录或选择性记录异常心电的心电图机，为早期心脏病人的诊断和康复期病人的监护提供了有效手段。从安全角度考虑，心电图机分为B型、BF型和CF型三类。

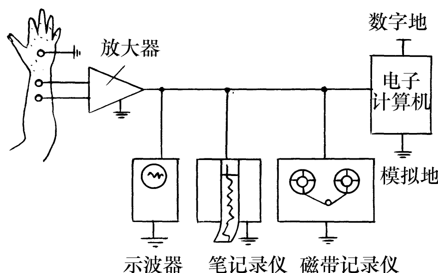
电剂量 electric dose 对机体疾病的治疗有药物治疗和电治疗两大类。电治疗与药物治疗一样也有剂量问题，俗称电剂量。“电”作用于生物机体上会发生一系列的物理、化学、生物学变化，即产生生物效应。适中的生物效应大小就可达到对肌体的治疗目的。其相应所作用的“电”强度[如电刺激强度、X(γ)射线和高能电子束等电离辐射强度等]即为电剂量。例如对感觉运动和小脑皮质有效刺激的电荷密度(即有效电剂量)在 $10\sim300\mu C/cm^2$ 范围内。

脑电图仪 electroencephalograph(EEG) 用圆盘电极在头皮表面记录到的电位变化称为脑电图。把电极直接置于暴露的大脑皮层表面记录到的电活动称为皮层电图。如用深部电极插入脑的深部皮层下各种结构记录其电活动，得到的是深部脑电图。

描记脑电图的最常用仪器，有专门记录脑电图的专用型脑电图仪和可以记录脑电的同时还可记录心电、肌电、诱发电位、呼吸、血压等多种生理信号的多用型生理记录仪。脑电图仪主要由输入、放大、调节、记录和电源五部分组成。

肌电图仪 electromyograph(EMG) 用于记录肌肉生物电活动随时间变化关系的图形(即肌电图)的装置，并作出一定的分析、处理，以评价肌肉及其控制系统的功能，对病变部位定位诊断，确定病变性质、损伤程度和再生恢复情况。世界上第一台肌电图机是 Erlanger 于1922年研制而成。肌电图仪一般有电极、放大器、示波器、记录器、刺激器和信号处理几个部分组成。

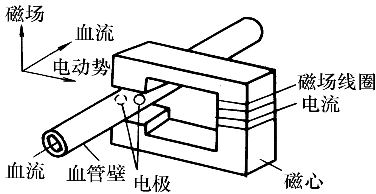
神经电描记术 electroneurography 神经纤维活动产生的生物电称为神经电，检测并记录人体某些部位(如上臂、下腿或面部表皮上)的神经电变化曲线(即神经电图)的装置、设备、手段，即是神经电描记术。它包括病人姿势安排，电极应用，神经的刺激及记录反应信号等环节。其中，神经电图的测量电路及有关设备如下图所示。



神经电图测量的电路及设备示意图

电磁式血流计 electromagnetic blood flowmeter 一种基于法拉第电磁感应定律的定量测量血流的仪器。一般是在血管暴露的情况下从血管外壁进行测量。工作原理如图所示。

将磁场垂直加于血流体上，由于血流导电，在流体中产生与血流和磁场方向都垂直的感应电动势，测量该感应电动势 e，$e = BDv\times10^{-8}$(V)，式中 B 为磁感应密度(G)，D 为电极间距离(cm)，v 为血管截面上血流平均速度(cm/s)。由此得到的血流平均速度乘以血管截



电磁血流量计工作原理

面积，即得到血流量。

心音图仪 electrophonocardiograph 是检测和记录心音和心杂音图形（即心音图）的装置，也称为心音计。通常由传感器、放大器、滤波器和记录器等部分组成。其中传感器主要功能是拾取心音，把声波转变为电量。

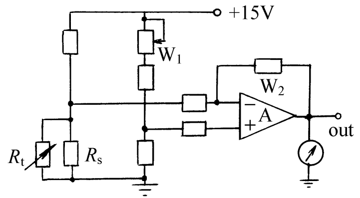
心音是指在心脏运动过程中，由心肌的舒缩和瓣膜的开放与关闭引起的心内和邻近大血管内的血流冲击及血管振动音；心杂音是由心脏和邻近大血管内血液湍流和涡流所引起的振动音。各类心音和心杂音的频率成分不同，经常测量的频率范围大约为 20～1000Hz。

脉搏图仪 electropulsegraph 用传感器检测出脉搏现象中包含的物理量（如血管内压、容积、位移和管壁张力等）的变化，并使用适当的记录或显示装置描记出变化曲线，这种检测和记录显示装置即是脉搏图仪（脉波计或脉搏计）。动脉血管随心脏收缩与扩张而周期性搏动的现象，称为脉搏。

按传感器的原理分类，有应变式压力脉波计，压电晶体式压力脉波计，光电式容积脉波计，水银应变式脉波计和电阻抗式容积脉波计等。

电体温计 electric thermometer 利用某些电子元件对温度敏感，其某种参数与温度保持确切关系的特性进行体温测量的仪器称为电子体温计。其结构通常包括测温探头（传感器），测量放大温度信号的电子电路和显示部分，有的还包括可记录温度的动态变化曲线的记录器。

图示为一种电体温计的基本电路，它采用热敏电阻 R_t 测温。由电桥检出温度信号，经放大器 A 放大后进行显示或记录。



一种电子体温计的基本电路

生理记录仪 electrophysiolograph 以一定方式记录多种生理信号如心电、心音、脑电、肌电、神经电位、胃肠内压等信号波形的形状及其随时间变化的规律的装置。它应有足够的频率响应、适宜的阻尼和良好的线性。

常用的生理记录与显示装置有检流计式记录器、磁带记录器、线阵记录器、计算机终端显示等。

电子显微镜 electron microscope 以符合电子光学条件的电子为光源，以电场或磁场作透镜的用来测量样品微观形貌的电子光学仪器即为电子显微镜，亦简称电镜。当电子束穿过物质时，由于库仑力的作用，其运动方向将改变，并损失部分能量，形成携带有试样材料本身物理和化学性质信息的透射电子、背散射电子（反射电子）、吸收电子（能量吸收）、二次电子、特征能量损失电子、特征 X 射线等信号，由计算机进行分析成像，得到试验样品材料的微观形貌、超微结构和化学成分分布等。电镜一般由电子光学系统、电路系统、真空系统、辅助系统等组成。电镜的主要指标是分辨率。依据电镜接收试样信号的方式不同分为透射电镜、扫描电镜和综合分析电镜。

电刺激 electrical stimulation 电刺激是使一定波形、幅度、持续时间、重复频率或能量的电流按一定方式经负电极（正电极取为无关电极）作用至可兴奋组织，使之兴奋，以达到治疗和控制的目的。电刺激能使神经和肌肉等可兴奋组织兴奋，改变 Na^+、K^+ 等离子的通透性，在组织中产生离子电流。其作用有：(1)在沿神经通道上发动或阻断动作电位的传导；(2)使某肌群受刺激后收缩；(3)诱导麻醉状

态。电刺激已在心脏电起搏、电除颤、止痛及其他治疗和康复医学中得到广泛应用。

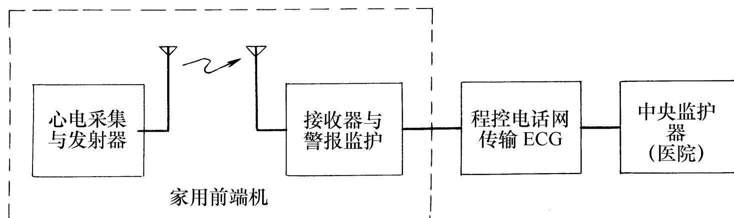
电击 electric shock 患者或操作人员与电气设备接触时的触电现象称为电击。电击可分为宏电击和微电击两类。电流经皮肤而流过人体所产生的触电现象称为体外电击或宏电击。电流不经皮肤而直接流入体内时所产生的触电现象称为体内电击或微电击。将病人与所有接地物体以及电源绝缘,或使病人与所有可能接触的导体表面保持在同一电位上,可防止电击。

发射型计算机断层成像 emission computerized tomograph(ECT) 计算机断层成像术是一种运用计算机和投影重建理论的三维成像技术。它利用体外测得的数据,将人体某一特定断面上组成的形态或病理变化用无重叠二维图像的形式表现出来,并进而由一系列二维图像构成三维图像。利用注射入人体内放射性示踪核素发射的γ光子,实现计算机断层成像的系统称为发射型CT(Emission CT,ECT)。

遥测心电图"机" radio-electrocardio-graph 针对平时能正常活动,不需卧床或住院,但又可能突发心脏病的患者,利用先进的电子技术和信号处理技术,对离床、离院的病人进行心电图监护的系统。

该系统以普通使用的电话和单片机为基础,在家中近距离无线电遥测和警报监护,远距离用电话线将心电图传至医院,实现多家众多病人能及时得到医院或救护中心的监护和急救处理、病理分析、统计、病理管理等多项医疗功能的监护诊断。

下图是一个典型的家用遥测心电图"机"的示意图。



电子呼吸描记器 electropneumograph 通过呼吸波传感器拾取呼吸信号,由电路放大去噪,最后由记录显示装置输出,以此来计测呼吸次数、监测呼吸的模式,并根据记录显示的呼吸波形形态及随时间变化的曲线来获得关于肺功能的各种信息,这样的装置称为电子呼吸描记器。

脑电图导联 EEG leads 脑电图是头皮上两电极间电位差的波形图,每一脑电导联必有两个电极。放在相对零电位点(一般取耳垂)的电极称为无关电极,或参考电极、不活动电极、标准电极等,而放在非零电位点上的电极(即放在头皮上的电极)称为活动电极或作用电极。脑电图的导联方法一般分为单极导联法和双极导联法。单极导联法是将活动电极置于头皮上,并通过导程选择开关接前置放大器的一个输入端(G1),无关电极置于耳垂,并通过导程选择开关接前置放大器的另一个输入端(G2),这样产生于活动电极的阴性电位变化将作为波形向上的阴性波形记录下来。双极导联法不使用无关电极,只使用头皮上的两个活动电极,记录下的是两电极部位脑电位变动的差值,可大大减少干扰,排除无关电极引起的误差。

输入浮地式心电图机 input floating type electrocardiograph 即心电图仪的输入级的"零电位"和被测试者右腿电极与机壳相隔离(绝缘),即不接地,使此"零电位"相对于大地的零电位来说是一个悬空的"零"电位。这样前置放大器的零电位与主放大器电源的零电位相隔离,保证了被测试者的右腿电极与大地间存在一个较大的绝缘阻抗,从而确保了被测

试者的安全。

电子血压计 electrosphygmomano-meter 电子血压计是在机械水银(汞)式或指计表式血压计测血压原理的基础上,加上电子电路后实现半自动或全自动测血压的小型检测仪表。就其手臂式而言其种类主要分两大类:一类为在机械式血压计中将人工听诊器部分改为电子听诊器,将手臂肱动脉在加减到一定压力后产生的科罗特夫音(Korotkoff's sound),经电-声换能器转换成电信号放大产生声、光信号,供监听、监视判断出收缩压(高压)和舒张压(低压);另一类为目前应用十分广泛的数字式电子血压计,采用压力传感器将手臂肱动脉跳动的压力变化转换成电信号,再经电子电路、单片机等进行处理,自动判断出收缩压、舒张压及心率并将结果显示在显示屏上,一般对臂带加、减压力的充、放气过程采用手动气囊或自动气泵两种形式,后者即为全自动电子血压计。另外市面上还有一种指式电子血压计,一般认为这种方法准确性不如手臂式高。

有许多使用者误认为手臂式电子血压计测血压不准,其实在血压计质量合格的条件下,这主要是使用方法不当(未严格按照说明书操作)所造成。

电泳仪 electrophoresis apparatus 电泳仪常用来作血清蛋白、糖蛋白等颗粒的分离、鉴定和含量测定等,对肝病、肾病综合症、冠心病及某些恶性肿瘤等都有一定的辅助诊断价值。所谓电泳,就是指带电颗粒(如病毒、细胞、环蛋白分子和合成粒子等)在电场作用下向与自身相反电荷方向电极移动。由于带电颗粒净电荷、体积等各异,因此运动速度不一样,使得各种颗粒之间的距离不一样,从而被分离成许多区带,如血清蛋白中所含各种蛋白,在电泳后依次形成 α_1、α_2、β 和 γ 等球蛋白区带,从而可测出这些球蛋白的含量等。电泳仪主要由主机和电泳槽两大部分组成:主机除提供高质量可调电源供电极使用外,随着电子技术的发展还逐步设有控制电路和信号处理电路等;电泳槽内安装有支持物(如纸条、淀粉板等)、正负电极、缓冲液、搁板等,被测样品放在支持物上。

根据电泳槽中采用支持物的不同,电泳法可分为纸电泳、聚丙烯酰胺凝胶电泳、等电聚焦电泳、免疫电泳等多种。

二、激光医学
Laser Medicine

激光医学 laser medicine 激光是物质受激辐射所产生的相干光,又称"莱塞"(light amplification by stimulated emission of radiation, Laser),原意为光受激辐射放大。激光器是一种特殊的光源,所发射的激光具有强度高、单色性好、方向性好、相干性好等特点。激光作用于生物体,主要引起热、压力、光和电磁场四种效应。

激光医学中最常用的激光器可按工作物质(激活介质)分为固体激光器、气体激光器、半导体激光器和液体激光器四种。依据激光器工作方式的分类,还可分为连续式、脉冲式、超短脉冲式、Q 开关等类型。

自从 60 年代发明了激光技术以来,激光器械及其在各种领域的应用取得了突飞猛进的发展。生物医学是最早应用激光技术的领域之一,1961 年就制成了红宝石激光视网膜凝结机,应用于眼科临床。1963 年开始应用激光治疗恶性肿瘤。此后,激光在皮肤科、外科、口腔科、眼科及病理、化验等广泛的医学领域内得到应用,并形成了一门新的边缘学科——激光医学。1975～1987 年间,已召开了七届国际激光医学会议,激光医学在国内外获得了很大发展。

三、核医学
Nuclear Medicine

核医学 nuclear medicine 核医学也叫原子医学,它是研究放射性同位素和核辐射技术在医学上应用的科学。目前应用于医学的放射性同位素已有数十种,应用于医学的放射线有 X、γ、β、α 射线,中子射线,高速运动的电子束,质子束及其他离子束。它们被广泛应用于医

学的各个领域，包括疾病的诊断，治疗，医学基础研究，新药的研制。例如 X 光机，γ 照相机，XCT 机，NMRCT（核磁共振）都是根据射线穿透物质的特性制成的，用于人体内部组织病变的诊断。γ 刀，钴－60 治疗机，电子直线加速器已成为治疗恶性肿瘤的有效手段。放射性同位素碘－131 可以用来测定人体的甲状腺功能、放射免疫分析已广泛用于临床诊断和病理研究。采用中子射线辐照技术可以培育出新的菌种，用以制造出性能更好的抗菌药物。

随着研究的深入，技术的进步，核医学也与其他生命科学一样，正以前所未有的速度向前发展，将不断地给人类带来更多福音，具有广阔的前景。

四、微波医学
Microwave Medicine

医用微波频率 microwave frequency for medical application 为了防止对微波通讯和导航等的干扰，国际上统一规定医疗专用频率，在微波频率（300MHz～300GHz）中，其中最常用的频率是 58MHz、433MHz、915MHz、2450MHz、22GHz 等。人们采用这些频率的电磁振荡来对病人进行诊断或治疗。

微波诊断 microwave diagnosis 人体组织是一种有损耗的电介质，皮肤、脂肪、肌肉、骨骼、血液和脑等各种器官以及各种病变组织的介电常数各不相同。当微波在人体中传播时，遇到不同组织的分界面以及通过不同组织时，就会产生反射、衰减、相移、散射和衍射等，测定这些参数的变化就可以进行无创伤诊断。诊断可利用接触式照射器逐点测量或定点测量，也可用微波断层扫描（配有计算机数据处理系统）来进行。例如对乳腺癌、颅内肿瘤、肺气肿及肺水肿等已用于临床诊断。

微波理疗 microwave physiotherapy 微波物理治疗可分为两种：一种为利用微波热效应与非热效应治疗纤维组织炎、颞颌关节炎、肋软骨炎、神经痛、耳软骨膜炎、网球肘、外科感染、肠粘连、急性冠周炎、前列腺炎和前列腺增生症等；另一种为利用微波组织凝固法治疗宫颈糜烂及尖锐湿疣等。均已用于临床。

热疗治癌 hyperthermia to treat cancer 由于肿瘤组织为非正常组织，它的含水量比正常组织高，而血流量较正常组织小，因此，当高强度微波照射肿瘤部位时，肿瘤组织吸收的微波能量超过正常组织，而它的散热又比正常组织差，所以，肿瘤的温度比正常组织高出 5～7℃，从而可严格控制加热温度以杀死肿瘤细胞，而对正常组织没有伤害，达到治疗癌症的目的。

微波照射器 microwave applicator 它是向人体病灶发送微波的器件。不同的病灶部位和治疗目的，对照射器将提出不同的要求，但也有共同的，即要求它有效地被人体病灶吸收，在人体表面的反射尽可能少；另外还要求它泄漏到非治疗区的能量要小。这样才能达到对病人疗效好、副作用小，对操作医师安全的目的。

微波源 microwave source 产生微波能量的装置称为微波源。不同的治疗目的，需要不同频率和不同功率的微波能量。有连续波源、也有脉冲调制波源；有用磁控管、也有用微波晶体管来产生微波振荡。对微波源的要求是输出功率和频率的稳定性。

穿透深度 penetrating depth 微波能量进入人体组织后将被吸收而产生衰减，当其入射功率降低到原来的 $1/e^2$（即 13.5%）时的深度，定义为穿透深度。穿透深度与频率的平方根成反比。

温度监控 temperature monitor 温度监控是热疗治癌的重要组成部分，由于癌组织边缘是不规则的，温度监控一定要使所有存在癌细胞的地方都达到致死的温度，温度不够会引起癌细胞的扩散。且测温与微波照射应同时进行，才能反映该处的真实温度。这就要求测温元件应尽可能少干扰微波场，并能即时调整微波输出功率以达到有效治疗的目的。

阻抗匹配 impedance matching 微波照射器加上人体的被照射部位组成一个整体接到微波源上，为了使微波能量有效地传输给人体，一定要使“微波照射器加上人体的被照射部位”的输入阻抗与传输线的特性阻抗相匹配，

并尽量做到微波源的输出阻抗也与传输线的特性阻抗相匹配。

微波防护 microwave protection 由于高强度的微波对人体会产生有害的副作用:对眼睛引起晶状体混浊或白内障的视觉效应;对睾丸有抑制精子产生的生殖腺效应;影响受精胚胎,使胎儿畸形和发育缓慢的染色体效应;引起失眠、嗜睡、头痛、疲乏的中枢神经效应;影响血红蛋白合成和白血球减少的造血系统效应以及影响内分泌的效应等等。对从事微波技术工作的人和接受微波治疗的病人的病灶以外的部位当剂量大于安全标准时都应采取适当的防护措施:穿戴特制的防护眼镜和织有铜或银的微波防护服、防护帽。

五、运动医学和热医学
Motor Medicine and Heat Medicine

滑轮牵拉器 pulley tractor 在理疗和骨科中,常用不同器械和人的本身重量作为阻力来治疗疾病。滑轮牵拉器是用滑轮牵引静力平衡原理做成的治疗装置。图 1 是牵拉小腿的装置。图 2 是小腿弯曲 90°时的受力图。用于伸屈小腿锻炼其股四头肌。

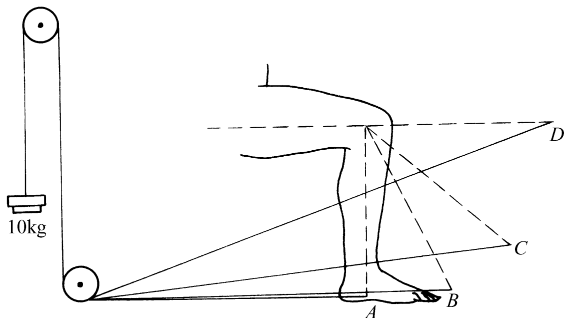


图 1 牵引小腿的滑轮装置

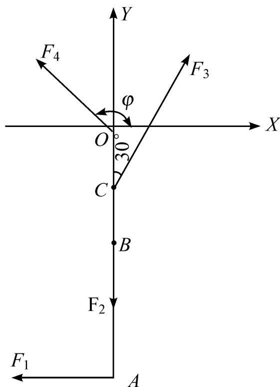


图 2 小腿弯曲 90°时的受力图

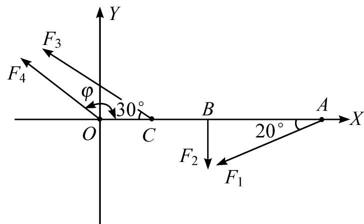


图 3 小腿平伸时的受力图

根据静力平衡三条件：$\sum F_x=0$，$\sum F_y=0$，$\sum M=0$，F 为力，M 为力矩，已知 F_1，F_2，L_1 和 L_3 可求得 F_3，F_4 和 φ 角。图 2 中 O 是膝关节支点，OA 是小腿长 L_1，中点 B，$BO=L_2$；F_1 为牵引重物，小腿重量 F_2，四头肌的拉力 F_3，设拉角恒为 30°，C 是四头肌在小腿骨上的附着点，OC 为 L_3，F_4 是膝关节在 O 点作用于小腿骨的力。

例如已知 $F_1=10\text{N}$，$F_2=4\text{N}$，$L_1=60\text{cm}$，$L_3=15\text{cm}$。

根据静力平衡三条件方程为(腿弯曲 90°)

$$F_3\sin30°-F_1-F_{4x}=0$$

$$F_3\cos30°-F_2+F_{4y}=0$$

$$F_1L_1-F_3L_3\sin30°=0$$

可解得 $F_3=80\text{N}$，$F_4=71.8\text{N}$，$\varphi=245°$

若腿平伸，同样作力图 3，可写出平衡方程

$$F_1\cos20°+F_3\cos30°+F_{4x}=0$$

$$F_3\sin30°+F_{4y}-F_1\sin20°-F_2=0$$

$$F_1L_1\sin20°+F_2L_2-F_3L_3\sin30°=0$$

即解得 $F_3\approx43.4\text{N}$，$F_4\approx49.1\text{N}$

$$\varphi=343°$$

由上述计算结果可知，当小腿由弯曲 90°到平伸时，四头肌的拉力由 80N 降到 43N，膝关节压在小腿骨的力则由 72N 降到 49N，此力的作用方向则由 245°变为 343°。

氮麻醉 nitrogen anaesthesia 因人在高压环境中呼吸的压缩空气，其中氮分压提高，溶解于体内的氮增多，可以引起氮麻醉。潜水员在水下深度到 39～46m 时出现轻微的麻醉症状——表现冷漠；深度到 46～60m 时表现懒散；深度达 60～72m 时行动不灵活，笨拙；深度超过 91m 时则不能工作，出现酒醉样，然后意识模糊。

高压氧疗 high-pressure oxygen treat 高压氧疗在体内的作用是提高动脉氧分压、氧饱和度或氧结合量，增加细胞组织的氧供应量，以满足机体的需要。一般是让病人进入高压氧舱来处理的。高压氧舱为耐高压的密封容器，用空气压缩机将空气压入舱内，产生数倍于大气压的高压，人在高压空气的环境下用面罩吸入纯氧，这时面罩内的纯氧压强是与舱中的空气压强相等，从而使血液中溶解的氧含量增加，达到缓解缺氧的目的。

离心分离器 centrifugal separator 在医学中经常使用手摇离心分离器或电动离心分离器来加速悬浮物的沉淀或用来研究病毒及蛋白等。图 1 为手摇离心分离器，利用装置旋转轴的套筒，从垂直位置转到接近水平位置时(图 2 中的虚线)，使套筒内试管中的液体由于轴旋转时惯性离心力 $m\omega^2r$ 的作用不会流出来。

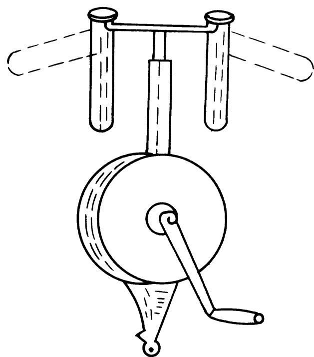


图 1 手摇离心分离器

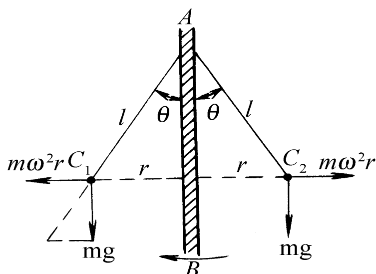


图 2 作用于套筒中质点上的力

从图 2 得知套筒的倾斜度由离心力、重力和棒之张力处于相对静止时得 $\cos\theta=\frac{g}{\omega^2l}$，实际为图 3，悬浮微粒在较轻液体中的下沉受离心力、液体的浮力和阻挠微粒下沉的摩擦力的作用，达到平衡后匀速下降。

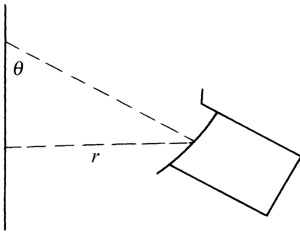


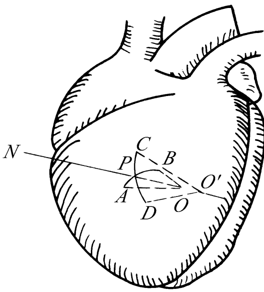
图 3　旋转试管的实际位置

心脏的跨壁压　cardiac transwall pressure　血管是具有弹性的圆柱形管，管壁呈弯曲面，故有附加压强，叫做跨壁压 P_{TM}。若血管内压 P_{iv}，组织液压 P_T，则

$$P_{TM} = P_{iv} - P_T = \frac{\beta_c}{r}$$

β_c 为血管壁张力系数，r 为血管内径和外径之和的平均值。

在图中，心脏表面任一点 P 都可以求出该点



心脏的跨壁压

的跨壁压

$$P_{TM} = \beta\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)$$

β 为 P 点的平均心壁张力系数，R_1 和 R_2 是 P 点心脏表面发线 PN 与之垂直且正交的两圆弧 APB 和 CPD 的半径。上式适用于血管管壁厚度比曲率半径小得多的情况。

重量　weight　如果把地球当作惯性系统，则一物体的重量就是它所受到的重力，即地球作用于这一物体上的引力，这力将使物体向地心加速运动，物体在向心运动中将挤压其支持物，直到支持物施于物体的力与重力大小相等和方向相反时物体就静止下来。因而可用物体对支持物如磅称的压力来度量物体的重量。

超重　overweight　载人飞船起飞时是向上加速运动，以克服地心引力并逐渐增大飞船的速度，使之能以一定速度进入轨道。此时从地面观察者来看，飞船中的航天员仍然受到地球的吸引，其重量因飞船上升而略有减少。但对飞船中的航天员，他除了受重力的作用外，还受到一个惯性力的作用，而他是无法区分这两种力的，因而航天员感到重量增加了(举臂费劲一些)，这就是我们所说的超重。

失重　weightlessness　当载人飞船进入轨道后，从地球上的观察者来看，整个飞船(包括其中的航天员)是在地球引力的作用下才能绕地球运行的，根本谈不上航天员的失重。但就飞船中航天员的感觉来说，他除了受到重力作用外，还受到一个惯性离心力的作用，这两个力大小相等(严格说只有飞船的质心才是这样)，方向相反。因此航天员举手投足几乎不需用一点力，搬动其他东西也是这样，这就是所说的失重现象。

沉降分析　sedimentation analysis　在低浓度溶液中的分散粒子，靠重力作用虽然能向容器底沉降，但如果粒子太小，(如比 1μm 更小的病毒和蛋白质胶体溶液)，则由于各种原因仅靠重力作用并不能沉降，只有在远比重力大的超速离心机的力场中它们才能沉降。这时，如果只存在同质量的粒子，它们将以相同的速度沉降；如果混有不同质量的粒子时，它们将以各自的固有速度沉降。因而从对粒子沉降状态的研究，可以检查溶液的均一性，这种分析方法即称为沉降分析。

射流　efflux　射流就是喷射成一束流动的流体(液体或气体)。利用射流在流动中的某些物理现象，做成各种不同性能的元件，然后把这些射流元件与一些附件组成控制线路，进行自动控制，这就是射流技术。

射流元件种类很多，在医学上用到的多数是附壁式射流元件。

射流的附壁　efflux attaching wall　当具有一定压强的流体从细小的喷嘴射出时，流束两侧

的静止气体被高速射流带动(称为卷吸作用),一部分气体随射流流动,在射流两侧造成局部低压区,而远处气体将不断流向低压区,以补充被卷吸带走的气体,这气体不断地被卷吸走,又不断地补充来。如图1所示:

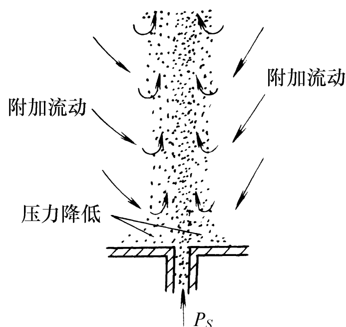
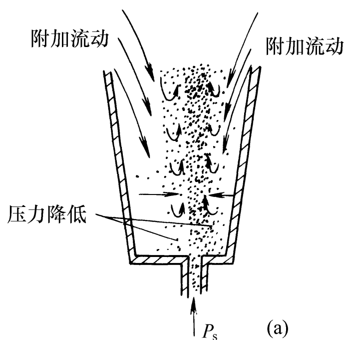


图1 射流的卷吸作用

若射流在两挡板间流动,如图2,若 $S_1 > S_2$ 因同一时间里射流在靠近喷嘴左右两侧被带走的空气量相等,使右侧抽走的空气百分率就比左侧的大,因时间短,大气来不及补充,则射流右侧压强比左侧小,即 $P_2 < P_1$。射流在压差作用下被推向右侧,右侧附加流动的空间进一步变小,卷吸流速变快,而左侧反之卷吸流速减小,从而两侧压差更大,射流被进一步推向右侧,最后射流附着在右边挡板上沿着挡板喷射出去,这种现象称为射流的附壁效应,如图2(b)。若在右壁下开一控制孔,使 $P_s > P_1 - P_2$,则射流被推向左壁,并附于左壁流动,见图2(c)。这个过程称为射流的切换,P_s 叫做切换压强。



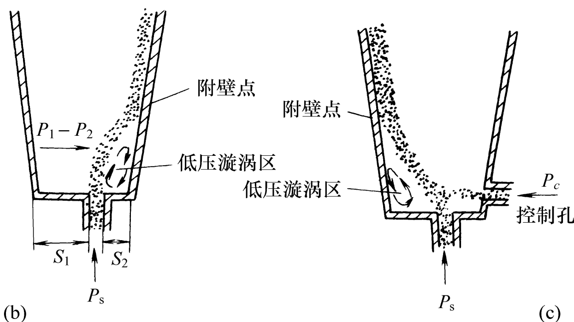


图2 射流的附壁效应和切换

附壁式射流元件 attaching wall efflux element 附壁式射流元件就是利用附壁效应制成的各种射流元件。图1所示的为其中一种,它是由盖板(上面装有喷嘴,排气孔等)、射流片和底板三部分组装而成。选用的射流片不同,射流元件的性能也不同。图2指示射流片上各部位名称和几何参数。

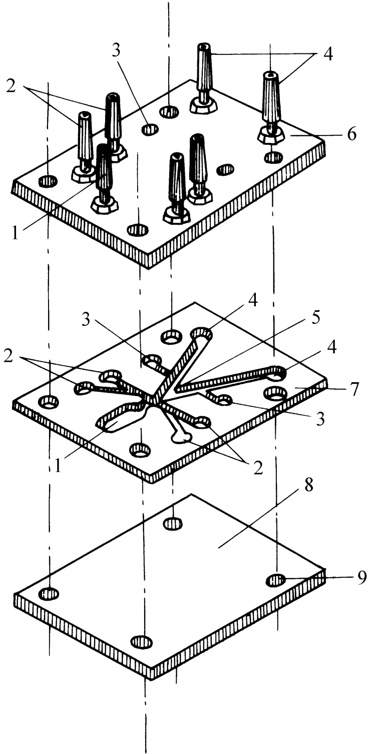


图 1　射流元件的构造

1. 喷嘴；2. 控制道；3. 排气孔

4. 输出通道；5. 分流劈；6. 盖板

7. 射流片；8. 底板；9. 固定孔

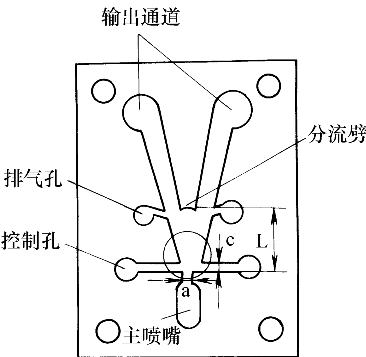


图 2　射流元件的名称

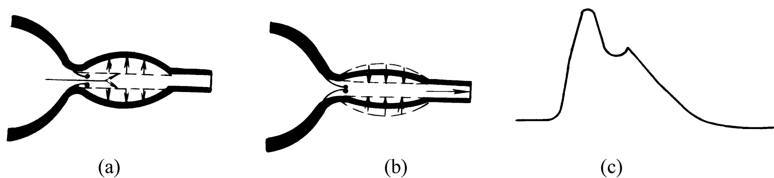
a. 主喷嘴宽度；b. 位差；c. 控制通道宽度；L. 劈距；θ. 张角

射流呼吸器 efflux respirator　射流呼吸器就是用射流元件做成的呼吸器，因为射流元件具有各种逻辑功能，很容易提供人工肺换气装置中吸气和呼气所需的脉冲气流，而且换气装置中所需的压强范围与元件和实际情况相接近。由于射流元件本身没有可动部件，用它做成各种类型的呼吸器，工作比较稳定可靠，结构简单，易于制造、消毒。

脉搏波 pulse wave　动脉血管是有弹性的。心脏的收缩和舒张有节律地将血液射入动脉血管，动脉血管将因弹性作用而有节律地扩张和收缩。动脉血管中的压强和容积的改变也是都有节律的，这种节律性改变在血管中向前传播，即形成脉搏波。

分析血流脉搏波，了解脉搏波的形成和传播速度，将对研究人的正常生理活动和疾病诊断具有重要意义。

脉搏图 pulse chart　脉搏的周期与心动周期一致，脉的频率、波幅和波型可借助于仪器进行描记，形成脉搏图。对于正常青年人压强脉搏图的基本波型如图中所示。



脉搏图(脉图)

(a)心室收缩期主动脉瓣开放(血管容积增大、压强升高);

(b)心室舒张期主动脉瓣关闭(血管容积减小,压强降低);

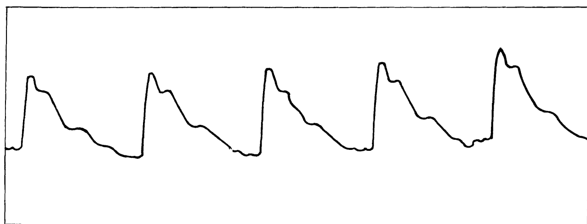
(c)脉搏图

根据压强脉搏图可以看出动脉血压在心室收缩期为最高值,称为收缩压(正常人平均 120 毫米汞柱),舒张期的动脉血压为最低值,称为舒张压(正常人平均 80 毫米汞柱)。

容积脉图 volume pulse chart 当脉搏式血流通过血管时,血管容积将会发生周期性变化。把血管容积的变化描记下来,则形成容积脉图。描记容积脉图的方法很多。电学法有电容式容积图仪和阻抗式容积图仪,目前国际上常见的是阻抗式容积图仪,它是利用高频阻抗和血管容积之间的一定比例关系,描记电阻抗变化图线表示容积脉图,现已用它描记心、肝、肾、头部和四肢等部位的动脉容积脉图,也称为血流图。如图所示为中指和手腕的阻抗容积脉图。



(a)中指



(b)手腕

人体辐射热 human radiation heat 物体经常以发射电磁波的形式散失能量,这种传热方式叫做辐射。人体辐射热就是人体以辐射红外线的方式散失的热量。它的波长范围在 5～20μm,最大强度在波长为 9μm 处。

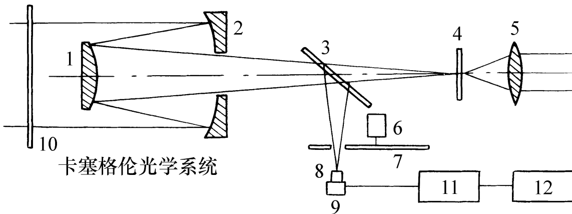
若物体总面积 A,物体的绝对温度 T_2,周围环境绝对温度 T_1,若 T_2-T_1 不大时,则物体在 τ 秒内辐射的热量 Q 卡,即

$$\frac{Q}{\tau}=4\delta T_2^3 A(T_2-T_1)$$

式中 $\delta = 1.38 \times 10^{-12}$ 卡/厘米^2·秒·度^{4}是一个比例常数。上式也适合人体，但辐射的面积只是人体皮肤总面积的85%，因为人体有些地方皮肤经常相互接触。

辐射温度计 radiation themometer 辐射测温是依赖于光子发射和吸收的非接触式测温。辐射测温探测器可以是光子探测器，也可以是热电探测器。测量部分可用光学法也可用电学法，或经光电变换后再用电学方法，这类温度计叫做辐射温度计。

红外体温计：辐射温度计（见下图）、红外显微镜、人体辐射体温计等基本构造有三部分组成：成像系统、探测器和选频放大器。



辐射温度计

1. 凸透镜；2. 有孔凹透镜；3. 半透片；4. 分划板；5. 目镜；6. 马达；7. 调制盘；8. Hg, Cd, Te；9. 致冷器；10. 保护窗；11. 放大器；12. 显示仪表

热像仪 thermal imaging system 温度测量从点到面，从静态到动态。人体上各部分的温度不完全相同，是个动态平衡。由于生理和病理的原因，局部组织的产热和散热条件不同，人体上有一定的温度分布图像，叫做温度图。得到温度图的方法叫热成像技术，所用的工具叫热像仪。

热像仪在医学上用于异常热点探查、血管异常分布和异常功能的检查和热现象有关的生理功能的动态观察等。

红外热像仪 infrared thermal imaging system 红外热像仪有多种类型：按辐射源波段分有近红外成像仪和中红外成像仪，它们都是用扫描技术成像。

红外线的波长规定为0.76～1000μm。分为三个波段：近红外（0.75～3μm），中红外（3～20μm）和远红外（20～1000μm）。人体辐射主要在3～50μm，辐射量的46%在8～14μm的中红外波段。

心脏的功和功率 cardiac work and power 血液在循环系统流动过程中所消耗的能量是由心脏作功得到补充的。心脏作功以增加血流的动能和势能。对于心脏所作的功，可以用心室内压强和从心室射出的血量的乘积来计算。因为在整个心动周期内，心室内压都是时刻变化的，所以应该用积分法来处理这类问题。即

$$W = \int P_V \mathrm{d}V$$

式中 W 代表心脏所作的功，P_V 代表心室内压，$\mathrm{d}V$ 代表从心室射出的瞬时血量（液体体积）。

功率是单位时间里所作的功。为此，在计算心动周期（搏）作功时用每秒输出或每分输出的平均血量计算即得心脏的功率。

六、超声医学
Ultrasound Medicine

医学超声 medical ultrasound 医学超声是研究超声波与生物媒质（主要指人体组织）的相互作用的机理、规律及其应用的交叉性学科，主要包括超声诊断和超声治疗两个部分。超声诊断主要研究超声波在生物媒质中传播时，超声波和生物媒质相互作用的机理和规律，利用各种组织的声学特性的差异来区分不

同组织，特别用于区分正常组织和病变组织。超声治疗主要研究在超声波辐照下生物媒质所产生的热、化学和机械等效应（即超声生物效应）的机理，以及超声波辐照剂量与所产生的生物效应之间的关系，并用于疾病的治疗。超声波在医学上用于临床诊断、康复治疗、监护和医疗保健，也可用于农林牧渔等。

超声诊断 ultrasonic diagnostics 用超声波诊断疾病的方法。常用的有反射法、显像法、多普勒法和心动图法等。可观察人体从体表到深部组织的不同反射波形、断层切面图像和心、血管的搏动规律等。临床用于眼、脑、心血管、肝、胆和腹部脏器的疾病诊断和妇产科检查。利用超声换能器向人体内发射超声脉冲，遇到组织器官界面时将产生反射脉冲信号，即脉冲回声信号，就能对此种组织器官进行定位，并检测组织的特性。

超声治疗 ultrasonic therapy 用频率从几百千赫到几兆赫的超声治疗疾病的方法，这是医学物理疗法的一种。利用超声波所产生的热、化学和机械等效应，从而引起人体组织发生一系列反应，并能使致病生物体发生破坏性改变。临床上用于神经痛、粘连及疤痕挛缩、挫伤、扭伤、腱鞘炎、关节炎等。

耳聋康复 rehabilitation of hearing loss 对用常规方法无法治愈的失聪者，采用助听器等方法来补偿其听觉能力，从而改善失聪者的语言交流能力，使失聪者回归主流社会的过程。

A 型超声诊断仪 A mode ultrasonic diagnostic device 采用超声换能器向人体内发射超声脉冲信号，超声脉冲遇到组织界面时将反射脉冲信号，即脉冲回声信号。在显示器上把振幅不同的脉冲回声信号按时间顺序排列。根据超声波在人体中传播速度，可以用不同脉冲回声信号间的时间间隔获知超声波在人体中传播的距离，而振幅的大小表示回声信号的强弱。人体组织的声阻抗各不相同，对超声脉冲的反射特性也不同，正常组织与病变组织之间的反射特性也不同。因此，在不同位置上出现稀疏稠密和幅度高低不同的脉冲回声信号，从而为临床诊断提供了信息。

B 型超声诊断仪 B mode ultrasonic diagnostic device 即超声图像诊断仪。常用的有机械扫描和电子扫描两类。利用人体组织的反射和衰减的差异，将从人体内部脏器测到的脉冲回声信息按时间顺序作辉度调制，形成与深度相关的各个光点。显示器上的光点与超声探头在体表移动时的空间位置同步显示，可得到被测脏器的实时断层图像。在临床上用于眼、脑、心血管、肝、胆和腹部脏器的疾病诊断和妇产科检查。

M 型超声诊断仪 M mode ultrasonic diagnostic device M 型是一种运动显示方式，用来表示反射界面的运动的情况。将从人体测到的脉冲回声信号以亮度的强弱来表示回声信号的强弱，同时在时间轴上加以展开。这样，人体中不动的界面显示为一条直线，运动的界面显示为曲线波形。M 型常用于心血管检查。

超声心动图 echo cardiogram 应用超声测距原理脉冲超声波透过胸壁、软组织测量其下各心壁、心室及瓣膜等结构的周期性活动，在显示器上显示为各结构相应的活动和时间之间的关系曲线，用记录仪记录这些曲线，即为超声心动图。分析各曲线间的距离、曲线形态及时间、振幅，各区的关系及连续性，与同时记录的心电图、心音图等生理参数间的关系，可用于诊断心脏疾病。

超声造影剂 ultrasound contrast agent 一种含有直径为几微米的气泡的液体。利用含有气泡的液体对超声波有强散射的特性，临床将超声造影剂注射到人体血管中用以增强血流的超声多普勒信号和提高超声图像的清晰度和分辨率。

超声手术刀 ultrasound scalpel 将高强度超声通过变幅杆聚焦于刀端，由刀的强烈振动可粉碎如肝、脑等软组织。临床用这种方法来切除人体软组织的肿瘤，粉碎了的肿瘤组织碎屑随时被冲洗并吸出，而周围的血管神经等不易损伤。故有无血手术刀之称。

超声碎石 ultrasound lithotresis 一种用超声波的机械效应从体外粉碎人体内部结石的方法。将聚焦超声换能器的焦点调至人体脏器中结石所在区域，把高强度的超声脉冲由聚焦超声换能器入射到结石所在区域，由超声波

所产生的机械效应将结石粉碎成小颗粒,随后排出体外。

听力计 audiometer 用于测量听力损失或听阈的一种仪器。通过气导耳机和骨导耳机分别测听,能较精确的通过耳机给被测者以一定频率和强度的信号进行测听。若信号为纯音,则为纯音听力计。若信号是语言信号,则称为语言听力计。通常一台听力机既可以发出语言信号又可以发出纯音信号,有助于了解耳聋的性质和评价治疗的效果。

超声多普勒 ultrasound Doppler 振动源和接收器在弹性媒质中作相对运动时,接收到波动的频率和振动源的波动的频率不同,其频率差与相对运动的速度有关,这就是多普勒效应。在医学上超声波的多普勒效应主要用于血流和胎儿的检查。临床常用的有连续波多普勒、脉冲多普勒以及将多普勒技术和B型超声实时成像技术结合的超声多普勒成像技术等。

七、磁医学
Magnetic Medicine

磁的概念 concept of magnetism 生物体本身存在电流和磁场,也不断地受到外界电磁场的作用,对生物体的成长发育和病变等有相应影响。在磁医学中,磁的概念和强度度量等也如物理学中定义相同。现就主要磁的概念简叙如下:

磁感应强度为通过单位面积的磁感应线数。通常以符号 $\boldsymbol{B}$ 表征,$\boldsymbol{B}=4\pi\boldsymbol{M}+\boldsymbol{H}$,$\boldsymbol{H}$ 为外加磁场,$\boldsymbol{M}$ 为磁化强度,磁化强度表征物质内磁矩总和,以高斯表征。

磁场的分布,可用磁感应线来表述,是具有方向的曲线,线上每点的切线方向与该点的磁感应强度矢量方向一致。

$\boldsymbol{B}$ 单位以高斯,或韦伯/米^{2}表示。

$\boldsymbol{H}$ 单位以奥斯特或特斯拉表示,1特斯拉=10^4高斯。

在不强的磁场中,$\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{H}$ 成正比,$\boldsymbol{B}\propto\boldsymbol{H}$ 或 $\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$,$\mu$ 称为磁导率,真空中 $\mu=1$。

磁导率为单位磁场下的单位面积的磁通量。当 μ 随 $\boldsymbol{B}$ 在变,而且很大时称之为铁磁物质。

磁石 magnet 磁石,人们称之为吸铁石,即天然磁铁矿石。矿石成粒状或块状,黑铁色不透明,有金属光泽,质致密而脆,具有吸铁之特征。磁石可治病,具有散风寒,强骨,通关节,平喘逆,国内外早有记载。战国时代名医扁鹊已利用磁石治病,希腊医生加伦(约129~200年)利用磁石治腹泻,11世纪阿拉伯医学家阿维森纳用磁石治肝病,脾病,水肿和秃头等症。

从远古的四氧化三铁,发展到今日21世纪的磁石种类繁多,有铁氧体,铝镍钴,钕铁硼等磁钢的问世,可制成粒状,粉状,块状,条状,针状等。

生物磁 biological magnetic 生物磁学是研究生物体的磁性和磁场作用于生物体后的性质的变化,及在磁场下生命活动之间的相互作用,相互联系的学科,是一门交叉学科。

一切物质均有一定的磁性,因生物体内外的任何空间均存有强弱不等的磁场,在地球上的生物体(动物,植物),在其生长过程中,均受到地磁的影响。地球上生命体时时受到地磁场的作用。所以生命体的产生,发育,生存,无时不在和地磁有着密切关联。

生物体本身存在电流(心电流,脑电流,肌电流),在通过外加磁场后,产生洛伦兹力,对其产生影响,改变方向,以致引起生物系统的一些功能性变化。如受其影响和干扰,则可致病,也可治病。

又如磁光效应、及磁圆二向色性,均为研究生命科学中微观构相不可缺少的手段。

磁共振成像 magnetic resonance image 磁共振成像(简称M.R.I)是基于核磁共振的原理。核磁共振是无线电波与物质相互作用的一种物理现象,M.R.I是利用磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 来实现成像。当在 x 轴上加一个有一定宽度的射频脉冲磁场 $\boldsymbol{B}$,$\boldsymbol{M}$ 会绕 x 轴旋转一定角度 θ,称之为倾角(flip angle),谓之共振激发。当加一射频脉冲使自旋磁化强度 $\boldsymbol{M}$ 激发到与磁场 $\boldsymbol{B}$ 垂直的平面上,被激发的原子核通过和周围环境交换能量,这时弛豫时间为 T_1(为纵向弛豫或自旋晶格弛豫)。当同类自旋核交换能量

时(时间常数为自旋—自旋弛豫)又称之为横向弛豫,以 T_2 表示。横向弛豫没有能量交换。纵向弛豫过程中吸收了射频脉冲能量,跃迁到高能级的质子要把能量传递给周围晶格,重新成为低能级的质子。

当退掉激发 RF 后返回到原来的热平衡位置则 T_1 和 T_2 的长短反映了自旋核周围的环境,T_1 与外场 $\boldsymbol{B}$ 有一定关联,$\boldsymbol{B}$ 大则 T_1 大。测量激发后的弛豫过程中的横向磁化强度,并实现可视化是 M.R.I 的基础。磁共振信号类型有自由感应衰减,自旋回波,受激回波,梯度回波,通常以测自旋回波和梯度回波的频谱为主。磁共振成像,其影像是人体中水和脂肪的分布图像,水和脂肪的特征对疾病的诊断很有价值,其缺点是不能提供有关正常与病理组织间细胞代谢足够信息。

心磁图 magneto cardiogram 心脏活动时,会产生微弱磁场,1963 年 Baule 和 Mcfee 首先报道心脏活动时,所形成的心脏磁场图形,称为心磁图,心脏活动时所产生的磁场极为微弱,而外在环境中的磁场有时较强,一度在临床上难以用来研究。

自 1970 年,Cohen 等采用超导量子干涉仪(SQUID)的磁力计测到心脏磁场,1974 年 Opfer 等研制出二次微分型(SQUID)磁通信,即可获得稳定的心磁图。心磁图可诊断某些心电图无法诊断的心肌损伤,而且对右心异常的诊断也是最佳的选择。心磁图与心电图一样,是由 P、Q、R、S、T 波及 U 波组成。

脑磁场 magnetic field of the brain 脑位于颅腔内,形态和功能很复杂并有很多不清楚的内容。脑的功能是由约 10^{13} 个神经和胶质细胞构成,脑神经电流在脑神经元细胞内外流动,因任何电流流动都能在其周围的区域内产生磁场,而脑的磁场强度仅为 10^{-13} T(特斯拉),即为地磁场的 1 亿分之一,甚至 10 亿分之一,在头皮附近任意一点可产生神经磁场。1968 年,Cohen 提出人类神经活动能产生磁场,1969 年超导量子干涉仪问世,能测到微弱生物磁场信号。

由外部条件影响,引起脑神经活动产生的磁信号可从复杂的噪声信号中分离出来,测量这种脑神经元的微弱磁信号的仪器,谓之脑磁图仪(magnetoencephalograpy),可研究脑部活动能得到脑活动的直接信息。

磁疗 magnetic therapy 磁疗是利用磁石,磁钢或外加交变磁场作用于人体的各个部位或穴位,以达到镇痛消炎的目的,可同时测量相关体位的某些信号等。从古代中医将磁石成药服入体内,到现今,利用恒定磁场,或利用高低中频交变磁场作用于人体,古今中外均有记载。到了 21 世纪,已制成了各种磁疗仪,磁诊断仪,脑磁图,心磁图,肌磁图,磁共振等可测出生物体中各种有价值的信号。

磁具有吸收氧和铁质以及排除血液中二氧化碳和氮的作用,磁疗能使细胞复合更新,改善体能,提高自愈能力,净化血液,促进新陈代谢。磁场也能促进骨折的愈合,降血脂降压,消肿,消炎镇痛等。

磁化水 magnetizing water 自然界的水是由氢、氧元素组成,水分子呈四面体排列,氧在中心,四个顶点由两个氢原子与两个氧原子上的两对电子所占据,水分子中连结氧原子的纽带为氢键,无数氢键的结合成为水,因为氢键的存在,在外界因素(如压力、温度、外场……)作用下,水的结构就发生变化,如氢键会弯曲,甚至断裂。

基于人们对磁石的了解,将磁场作用于水即为磁化水,水流经过一恒定磁场或交变磁场后,水的物理性质,化学性质,均有变化,如化学,光学,黏度,表面张力均有改变。

磁化水能治尿路结石、肾结石、蛔虫、腹泻,对血脂、肿瘤、酶、免疫、动物脏器,均有不同程度的影响。

磁性微粒(微球) magnetic particle 磁性微粒又名磁性小球,将微粒以一定比例混合成液状,或化合成液体,谓之磁性液体。获得此类微粒方法,不外乎用化学法或物理法(含机械法),如气流磨、星形磨等法制备而成,从微米量级到纳米量级的粒度,均可得到。

将磁性微粒以一定载体包裹而作成药丸,称之为磁性药丸,或磁导弹,能使药物直接进入病灶,而不扩散至全身器官,特别对肿瘤病人尤为重要。因抗癌药物杀伤力特强,不仅破坏

癌细胞,对周围正常细胞也破坏,现今国内外研制的磁性药丸(磁导弹),需具备对病灶有强的杀伤力和亲合性,但对周围的正常组织与器官无亲合性和较小杀伤力。

磁性微粒的制备用化学法,不外乎四氧化三铁,正铁酸盐,铁铝合金等制备而成较高磁导率微粉或纳米粉。通过载体材料如氨基聚合物,白蛋白,加热固化人血清蛋白等制成磁性药丸,通过不同方法也可制成固态微粒,用适当包裹剂包于其内使用,也用制备磁性造影剂。

磁热效应 magnetocaloric effect 磁力线通过人体细胞组织,在体内诱发内热,从而产生热量,在物理上称之为焦耳热。焦耳热起着消炎和镇痛作用,通过以热能量的方式来消炎。与电刺激疗法不同,焦耳热作用渗透到体内,而不是刺激脊髓。当磁场的焦耳热作用于人体内分泌细胞时,由于内分泌腺与血管压力不同,血管受到刺激,在焦耳热影响下,血管被扩张,可将血液中的养分供给了内分泌腺细胞,使内分泌腺具有活力,磁力线不能麻痹血管神经。当外加磁场为零时,血管会恢复原状,加强了内分泌腺间的渗透作用,使内分泌液不断进入体内血管中,增进体能。这种效应日渐被人们所采用。

Nonlinear Physics
非线性物理学

非线性物理学 nonlinear physics 系统的数学方程(如微分方程,偏微分方程)的解不满足线性叠加原理的系统称为非线性系统,例如,方程中有非线性的因变量函数,因变量函数与微分的相乘项,微分项的二次方和二次方以上的项,和不同阶次微分的相乘项等,一般称为非线性方程,这种系统的动力学行为是非线性的,它不能用线性方法进行研究。非线性动力学是研究非线性物理的基础,它的奠基者是数学家庞加莱,他进行了状态空间内定性大范围动力学、不动点理论等研究。

在物理学中,有很多非线性现象,例如范德波尔振荡。范德波尔广泛研究了极限环和张弛振荡,观察到非线性系统的重要现象:分谐的产生、滞后,参数空间内的有噪区域和各种分岔现象等。之后卡特赖特等人在数学上证明了受迫范德波尔振荡器有混沌解。又例如,在流体力学中,人们研究从流体的热传导、热对流到湍流(随着上下两层流体的温度差的增大)的过程中,发现它的平衡状态从一个分岔成三个、从局部分岔到大范围分岔(同宿分岔和异宿分岔)以致到混沌(洛伦兹混沌吸引子,它的维数不是整数!)。非线性色散介质中孤立子现象是又一个例子,非线性和色散作用使得“孤立”水波得以维持稳定,而数学上用来描述这种现象的 KdV 方程(非线性方程)的解正好是一维定常薛定谔方程中具有本征值的势。

三分子模型 trimolecular model 三分子模型又称布鲁塞尔振子。20 世纪 60 年代初期发现在硫酸溶液中丙二酸为溴酸盐所氧化,以铈作催化剂,反应在时间上会表现出还原和氧化状态的交替出现,若放在培养皿中,可以出现美丽的图形。普里高津(Prigogine)、勒菲弗(Lefever)和尼科利斯(Nicolis)模拟了该过程,提出三分子模型,得出两个耦合方程:

$$\dot{x} = x(b-1) + a^2 y$$
$$\dot{y} = -bx - a^2 y$$

因为他们是布鲁塞尔学派的,因而该模型也称布鲁塞尔振子。

洛特卡-沃尔泰拉模型 Lotka-Volterra model 洛特卡-沃尔泰拉模型也称猎食模型,它由方程

$$\dot{x} = k_1 x - k_2 xy$$
$$\dot{y} = k_3 xy - k_4 y$$

表示。式中常数 k_1、k_2、k_3 和 k_4 分别表示被食者总数增长速率、被食者遭遇猎食者后的死亡速率、猎食者总数增长速率和猎食者死亡速率。

一、状态空间
State Space

状态向量 state vector 一个动态系统的状态是以一组彼此线性独立的变量来表示的,由这些变量构成的向量称为状态向量。

状态空间 state space 由状态向量所张的空间称为状态空间。

状态方程 state equation 设 $x_1, x_2, \cdots, x_n$(连续情形)和 $x_1(k), x_2(k), \cdots, x_n(k)$(离散情形)是状态变量,由状态可以构成状态方程。一阶微分方程组

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)\\ \dot{x}_2 &= f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)\\ &\vdots\\ \dot{x}_n &= f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)\end{aligned}$$

或一阶差分方程组(k 是采样节拍)

$$\begin{aligned}x_1(k+1) &= f_1[x_1(k), x_2(k), \cdots, x_1(k), k]\\ x_2(k+1) &= f_2[x_1(k), x_2(k), \cdots, x_1(k), k]\\ &\vdots\\ x_n(k+1) &= f_n[x_1(k), x_2(k), \cdots, x_n(k), k]\end{aligned}$$

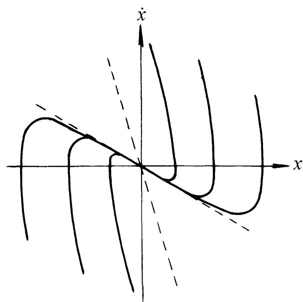
称为非自治状态方程组。若方程组中不显含 t 或 k,则方程组是自治的。这些方程组可以写成向量形式:

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{f}[\boldsymbol{x}(t), t]$$
$$\boldsymbol{x}(k+1) = \boldsymbol{f}[\boldsymbol{x}(k), k]$$

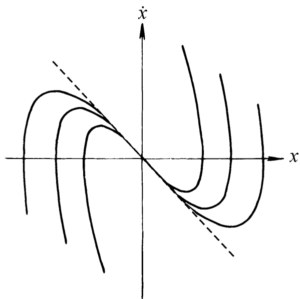
相平面　phase plane　二维状态空间特称相平面。

平衡点　equilibrium point　在状态空间中，速度场为零的点叫做平衡点。在相平面中，由平衡点的本征方程 $\lambda^2+\delta\lambda+k=0$ 的两个根 $\lambda_{1,2}=\frac{-\delta\pm\sqrt{\delta^2-4k}}{2}$ 的性质可以决定平衡点的分类。式中 $D=\sqrt{\delta^2-4k}$ 叫做判别式。

结点　node　判别式 $D>0$ 的平衡点称为结点。$D>0$，$\lambda_1\neq\lambda_2$ 对应寻常结点，$D=0$，$\lambda_1=\lambda_2$ 对应内弯结点。$\delta>0$ 表示正阻尼，λ_1，$\lambda_2<0$ 该结点稳定；$\delta<0$ 表示负阻尼，λ_1，$\lambda_2>0$ 该结点不稳定。稳定结点的相轨迹呈扭曲状。

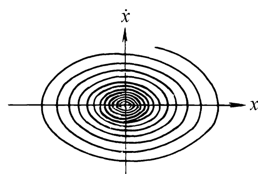


稳定结点的相轨迹



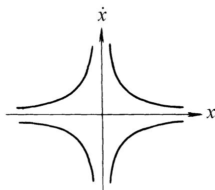
稳定内弯结点的相轨迹

焦点　focus point　判别式 $D<0$ 的平衡点称为焦点。$\delta>0$，该焦点稳定；$\delta<0$，该焦点不稳定。焦点的相轨迹呈螺旋形。一个衰减振荡的单摆，最后会停止摆动（速度场为零），静止在一点，该点就是它的平衡点——稳定焦点。



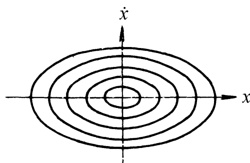
焦点的相轨迹

鞍点　saddle　对应 $k<0$ 的平衡点称为鞍点。鞍点不稳定，其相轨迹呈马鞍形，在相平面上有四条轨迹，它们有两条渐近线。鞍点是一种重要的平衡点，其渐近线有流入（稳定支）和流出（不稳定支）两条，它们可以构成分界。例如当一个单摆的初始位置达到 180°时，它摆动的方向并不确定，该点是不稳定的平衡点——鞍点。



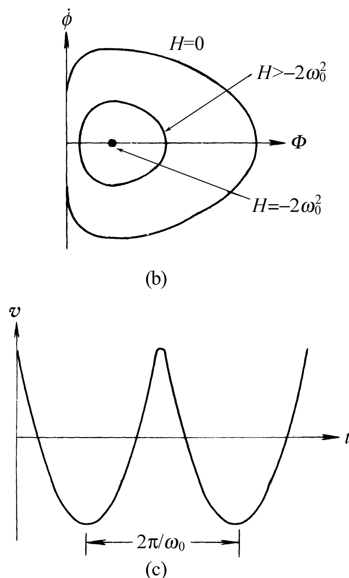
鞍点的相轨迹

中心点　center　$D<0$，$\delta=0$ 的平衡点称为中心点。中心点的相轨迹是椭圆，它的结构是不稳定的，只要稍有阻尼（正或负），中心点就变为焦点（稳定或不稳定）。一个理想单摆与垂直线夹角为零的点就是中心点。它在无阻尼状态下，永远摆动，只要稍有阻尼，最终会停止摆动。



（a）中心点的相轨迹

又如冷等离子体振荡，在略去电子压力和磁场的情形下，把电场写成势的梯度，且考虑行波解，可以得到冷等离子体振荡的运动积分，它的相图是一族椭圆（图 b），图中横轴上的 $H=-2\omega_0^2$ 的点就是中心点（ω_0 是冷等离子体振荡的圆频率，H 是哈密顿量）。图(c)是冷等离子体振荡电子平均速率与时间的关系。



(b)

(c)

映射 map 假定 X 是一个集合，如果对每个 $x\in X$ 作为第一坐标，都有一个且只有一个 y 与 x 结成有序对 $\langle x, y\rangle$，其第二坐标 y 的全体记为集合 Y，则所有这种有序对的全体是一个集合 f，这时称 f 为把 X 变到 Y 上的映射，记为 $Y=f(X)$。简单地说，映射就是变换。

同胚 homeomorphism f 和 f^{-1} 都是连续的双射称为同胚。

微分同胚 diffeomorphism 若一同胚是 C^n（可微分至 n 次）的，则称之为微分同胚。

流形 manifold 一个 n 维流形 M 是一个豪斯多夫空间。豪斯多夫空间是一个拓扑空间，使任意两个分开的点有分开的邻域，使每个点有一个开邻域 N 同胚于 E^n（度规欧几里得空间）的一个开集 U_i，即 $h: N_i\to U_i$。局部欧几里得拓扑空间一般叫做拓扑流形。

庞加莱映射 Poincaré map 设状态轨迹横截性穿过流形 S_0 和 S_1，令 q_0 和 q_1 是轨迹于时刻 t_0 和 t_1 与流形 S_0 和 S_1 的两个交点，则映射 $P(q): S_0\to S_1$ 就称为庞加莱映射。

庞加莱首次返回映射 Poincaré first return map S_0 和 S_1 是同一个流形时的庞加莱映射叫做庞加莱首次返回映射。

伯克霍夫抽象动力学 Birkhoff abstract dynamics 这是一种对动力学的抽象研究，它并不去解方程，而是把动力学系统考虑成一个微分同胚。在抽象的级别上，不再有微分方程，也不再有与之相关联的状态空间。例如：光滑流形 M 上定义了一个测度 μ，又定义 $f^t: M\to M$ 为保测度微分同胚的一个单参数群，则 M，μ，f^t 就称为一个经典动力学系统。

流 flow 流也叫相流，定义于 R^n 上。$\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的解是 $\boldsymbol{x}=\mathrm{e}^{At}\boldsymbol{x}_0$，$\mathrm{e}^{At}: R^n\to R^n$ 定义了 R^n 上的一个流，它包含了微分方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 所有解的集合。

中心流形 center manifold 切于中心本征空间的不变流形 $W^C(0)$ 叫中心流形。一般求法如下：设系统可分为稳定部分 $\dot{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}+\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 和中心部分 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$，其中 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in R^C\times R^S$，$\boldsymbol{A}\in R^C\times R^C$，$\boldsymbol{B}\in R^C\times R^S$，$f(0,0)$、$g(0,0)$、$\boldsymbol{J}f(0,0)$、$\boldsymbol{J}g(0,0)$ 均等于 0，方程 $\dot{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$ 的不动点是中心流形和中心空间相切的点。在中心流形 $W^C(0)$ 上任一点的坐标必须满足关系 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})$，它对时间求导：$\dot{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{J}[\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})]\dot{\boldsymbol{x}}$。在中心流形上的任一点，必须可代入 $\boldsymbol{y}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 和 $\dot{\boldsymbol{y}}$ 与 $\dot{\boldsymbol{x}}$ 满足的关系，于是得到：

$$\boldsymbol{J}[\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})]\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+f[\boldsymbol{x},\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})]\}$$
$$=\boldsymbol{B}\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})+g[\boldsymbol{x},\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})]$$

解出 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x})$。

李雅普诺夫意义中的稳定性 stability in the sense of Liapunov 设一系统存在平衡状态 $\boldsymbol{x}_e$，在 t_0 时刻稳定，则必须满足条件：对每个 $\varepsilon>0$，存在 $\delta(t_0,\varepsilon)>0$，使欧几里得范数 $\|\boldsymbol{x}(t_0)-\boldsymbol{x}_e\|<\delta(t_0,\varepsilon)\to\|\boldsymbol{x}(t)-\boldsymbol{x}_e\|<\varepsilon$，$t>t_0$，则称此平衡状态满足李雅普诺夫意义中的稳定性。例如一个理想单摆，它的摆动

永远不会停止，它在李雅普诺夫意义中是稳定的，但不是一致稳定，也不是一致渐近稳定。

一致稳定 uniformly stable 若满足 $\|\boldsymbol{x}(t_1-\boldsymbol{x}_e)\|<\delta(\varepsilon)$，$t_1\geqslant t_0\rightarrow\|\boldsymbol{x}(t)-\boldsymbol{x}_e\|<\varepsilon$，$t\geqslant t_1$，则称 $\boldsymbol{x}_e$ 在 (t_0,∞) 上一致稳定。

一致渐近稳定 uniformly asymptotically stable 若 $\delta_1>0$，满足 $\|\boldsymbol{x}(t_1)-\boldsymbol{x}_e\|<\delta_1$，$t_1\geqslant t_0\rightarrow\|\boldsymbol{x}(t)-\boldsymbol{x}_e\|\rightarrow 0$，$t\rightarrow\infty$ 则称 $\boldsymbol{x}_e$ 在 (t_1,∞) 上一致渐近稳定。例如，一个有耗单摆最终会停止摆动，它是一致渐近稳定的。

平衡点的稳定性 stability of equilibrium point 平衡点的稳定性是指系统受微扰后是否能回到该平衡点，若是，则该平衡点是稳定（渐近）的，否则是不稳定的。

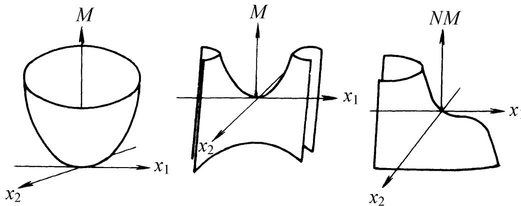
结构稳定性 structure stability 结构稳定性是指状态轨迹的结构是否变动。在系统状态方程上加一小量以微扰整个向量场，使得流在拓扑上和初始的流等效，则此系统在结构上是稳定的。

近似方法 approximation methods 非线性问题很难得到解析解，通常要用近似方法来逼近真正的解。常用的近似方法有两种。一是平均法，也称 KBM 方法（可用于自治系统和非自治系统），方法是在对非线性作用的情况下将振荡幅度和相位对时间的导数对相位求平均，从而得到振荡幅度和相位对时间的关系。二是迭代法，也就是逐步逼近的方法，例如：差分方程 $x_{n+1}=a-x_n^2$，先设定一个初始值 $x_0=b$，代入差分方程得到 $x_1=a-b^2$，再将该值代入上述方程，得到 $x_2=a-a^2+2ab^2-b^4$，再代 x_2 入原方程……，当 $n\rightarrow\infty$ 时，就得到真正的解。

二、突　变
Catastrophe

莫尔斯函数 Morse function 莫尔斯函数是一种任意标量函数：$M(\boldsymbol{x})$：$R^n\rightarrow R^1$，如果在某点存在 $\nabla M(\boldsymbol{x})=0$，则在该点满足

$$\det\left|\frac{\partial^2 M(\boldsymbol{x})}{\partial x_i\partial x_j}\right|\neq 0$$



莫尔斯函数与非莫尔斯函数

例如 $M=\pm x_1^2\pm x_2^2\pm\cdots\pm x_n^2$ 是莫尔斯函数，而 $M=-x_1^3-x_2^2$ 非莫尔斯函数。大多数准极值函数是莫尔斯函数。

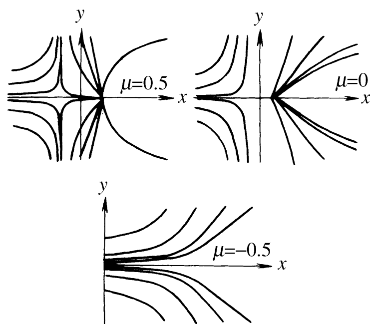
基本突变集 elementary catastrophe set 梯度系统 $\boldsymbol{f}=-\nabla V(\boldsymbol{x},\mu)$，$\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R}^n$，$\mu\in R^k$，若 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x},\mu)=0$ 有解，则必须满足 $\det\left|\frac{\partial f_i(\boldsymbol{x},\mu)}{\partial x_j}\right|=0$。满足条件 $\nabla V(\boldsymbol{x},\mu)=0$ 和 $\det\left|\frac{\partial^2 V(\boldsymbol{x},\mu)}{\partial x_i\partial x_j}\right|=0$ 的集合称为控制空间中的基本突变集。

汤姆突变理论 Thom's catastrophe theory 大多数光滑函数（无限次可微）$V(\boldsymbol{x},\mu)$[$\boldsymbol{x}\in R^n$，$\mu\in R^k$，$k<5$]结构是稳定的。对该族（V：$R^n\times R^k\rightarrow R^1$），任意点 $(\boldsymbol{x},\mu)\in R^n\times R^k$ 对 $\mu\in R^k$，$\boldsymbol{x}\in R^n$ 有一种坐标选择，使 x_i 随 μ 光滑地改变。函数 $V(\boldsymbol{x},\mu)$ 通常可为常数加如下函数之一构成：x_1；莫尔斯函数；折叠突变集；叉式突变集（＋）和双叉式突变集（－）；双曲脐（－）和椭圆脐（＋）；抛物（和双抛物）脐；第二双曲脐（－）和第二椭圆脐（＋）；符号（双符号）脐。

三、分岔与混沌
Bifurcation and Chaos

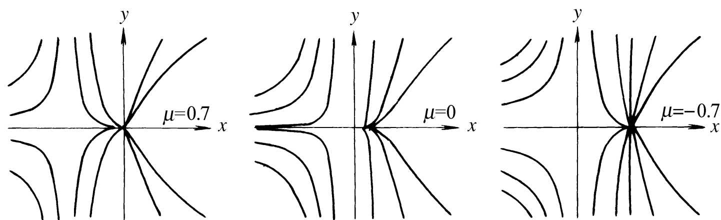
局部分岔 local bifurcation 在退化平衡点(分岔)或闭轨道(分岔)附近研究向量场,并作分岔分析,该分岔能在此极限集邻域内找到,这种分岔叫局部分岔。这时,平衡点的本征值的实部随着控制参数的变化而等于零,分岔产生。例如:鞍-结分岔、跨临界分岔、尖拐分岔、霍普夫分岔。

鞍-结分岔 saddle-node bifurcation 系统 $\begin{bmatrix}\dot{x}\\ \dot{y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\mu-x^2\\ 0\end{bmatrix}$ 的平衡点在 $\mu=0$ 处发生分岔,$x=0$,$y=0$ 的点是分岔点。分岔结果得到鞍点结点对,这种分岔叫鞍-结分岔,也叫折叠分岔。控制参数由大于零向零变化时,鞍点和结点相互靠近,在 $\mu=0$ 时相遇而湮没。



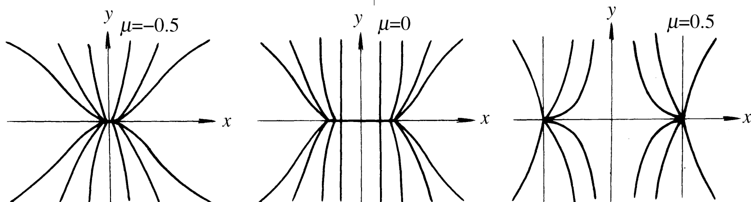
鞍-结分岔

跨临界分岔 transcritical bifurcation 系统 $\begin{bmatrix}\dot{x}\\ \dot{y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}x^2\\ 0\end{bmatrix}$ 的平衡点有两个,一个是鞍点,一个是结点。在控制参数由小到大变化时,该两平衡点会相互靠近,当 $\mu=0$ 时发生分岔,两平衡点相遇而湮没。μ 一旦大于零,又出现了鞍点和结点。从现象上看它们跨过了分岔点,所以称为跨临界分岔。



跨临界分岔

尖拐分岔 cusp bifurcation 系统 $\begin{bmatrix}\dot{x}\\ \dot{y}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x\\ y\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}x^3\\ 0\end{bmatrix}$ 在 $\mu<0$ 时只有一个平衡点:原点,它是稳定的结点。当 $\mu=0$ 时,发生分岔,原点变为不稳定的鞍点,而另外产生一对稳定的结点(位置对称于原点),在控制-相空间图上控制-相轨迹犹如双尖,因而称为



尖拐分岔的相图

尖拐分岔。

霍普夫分岔 Hopf bifurcation 系统 $\begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ x_2^3 \end{bmatrix}$ 的原点是平衡点。本征值是 $\lambda_{1,2} = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4}}{2}$。当 $\mu = 0$ 时,发生分岔,原点由稳定的焦点变成中心点,而后又变为不稳定的焦点,且产生一围绕原点的稳定的极限环。这种分岔称为霍普夫分岔。

倍周期分岔 period-doubling bifurcation 倍周期分岔是一种环的局部分岔,随着非线性运动方程控制参数的改变,一个极限环丧失了它的稳定性而出现了另一条闭轨道,其周期是原来那条闭轨道的两倍($2T$),当控制参数继续增加时,该闭轨道的稳定性会减弱而直至变得不稳定,于是又有一条稳定的倍周期轨道出现,其周期为原始轨道的四倍($4T$)…。在一些物理问题中可以观察到一系列 n 倍周期分岔,最后得到周期为 $2^n T$ 的稳定极限环。若 $n \to \infty$,则产生混沌。

切分岔 tangential bifurcation 迭代映射在与 45°线相切处产生的分岔称为切分岔。在切点附近要经过很多次迭代才能通过。

菲根鲍姆普适数 Feigenbaum universal number 在迭代映射 $x_{i+1} = F(x_i, \mu)$ 的倍周期分岔的控制-相图中,分岔有自相似结构:两个周期点被一个超稳定参数(斜率 $\partial f(x_i, \mu)/\partial x_i = 0$ 对应的不动点叫超稳定点,对应的控制参数叫超稳定参数)隔开,这些自相似结构有不变的标度因子。在超稳定参数上,相邻两分岔的相空间标度比是 $\alpha_i = l_i / l_{i+1}$,当 $i \to \infty$ 时,$\alpha_\infty = 2.502907875\cdots$。对应的相邻两控制参数差值比是:$\delta_i = \frac{\mu_i - \mu_{i+1}}{\mu_{i+1} - \mu_{i+2}}$,当 $i \to \infty$ 时,$\delta_\infty = 4.6692016\cdots$。$\alpha_\infty$ 和 δ_∞ 称为菲根鲍姆普适数。

泛函重整化群方程 functional renormalization group equation 一个倍周期过程,可以把函数 $F(i, \mu, x) = f\{\mu, f[\mu, \ldots, f(\mu, x)]\} \equiv f \cdot f \cdot \cdots \cdot f(\mu, x)$ 变成合成函数 $F \cdot F$,然后移动参数,把它从当前的超稳定值 μ_i 变到下一个超稳定值 μ_{i+1},再把标度因子 α 反过来:函数 $F \to -\alpha F \cdot F$,其宗量 $x \to -x/\alpha$。于是得到一个变换的极限式:

$$g(x) = \lim_{k \to \infty} (-\alpha)^k F\left[2^k, \mu_{i+k}, \frac{x}{(-\alpha)^k}\right] = -\alpha g\left[g\left(\frac{x}{-\alpha}\right)\right]$$

这就是菲根鲍姆泛函重整化群方程。

U 序列 U sequence 一个倍周期序列,每个周期有一个振荡,在周期倍增后,会有它自己的无限倍周期序列 2^n。对自然数 K,若每个周期有 K 个振荡,它们都有自己的无限倍周期序列 $2^n K$,这种序列叫做 U 序列。

沙尔科夫斯基序列 Sharkovskii sequence $3 \to 5 \to 7 \to 9 \to \cdots \to 2 \times 3 \to 2 \times 5 \to 2 \times 7 \to 2 \times 9 \to \cdots \to 2^n \times 3 \to 2^n \times 5 \to 2^n \times 7 \to 2^n \times 9 \to \cdots \to 2^n \to \cdots \to 8 \to 4 \to 2 \to 1$ 称为沙尔科夫斯基序列,用它可以预测周期的次序。使用规则:当有几个相同周期的事件发生时,只有第一个事件会出现在序列中。

大范围分岔 global bifurcation 平衡点或闭轨道的稳定流形和不稳定流形间没有横截性所表征的分岔叫大范围分岔。例如同宿分岔、异宿分岔。

同宿分岔 homoclinic bifurcation 鞍型平衡点自身的“流出”和“流入”间形成的分岔叫同宿分岔,它属于大范围分岔。

异宿分岔 heteroclinic bifurcation 鞍型平衡点之间的“流出”和“流入”间形成的分岔叫异宿分岔,它也属于大范围分岔。

梅尔尼科夫判据 Melnikov criterion 梅尔尼科夫判据是一种判定同宿分岔是否存在的判据。由距离函数

$$\Delta_\varepsilon(\theta_0, \theta_0) = \varepsilon \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{f}_0[\boldsymbol{x}_0(t - \theta_0)] \wedge \boldsymbol{f}_1[\boldsymbol{x}_0(t - \theta_0), t] \mathrm{d}t$$

构成梅尔尼科夫函数

$$M(\theta_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{f}_0[\boldsymbol{x}_0(t - \theta_0)] \wedge \boldsymbol{f}_1[\boldsymbol{x}_0(t - \theta_0), t] \mathrm{d}t$$

可以得到同宿分岔存在的条件:若存在足够小的 $\varepsilon > 0$,梅尔尼科夫函数有单零点,则对某个

$\theta_0 \in [0, 2\pi]$，如果流形 $W^U(\boldsymbol{x}^*_{\varepsilon,\theta_0})$ 和流形 $W^S(\boldsymbol{x}^*_{\varepsilon,\theta_0})$ 横截性相交，横截性同宿轨道存在。

符号动力学 symbol dynamics 符号动力学是一种粗线条描述方法，它用有限精度对动力学过程进行严格描述，得到结果。

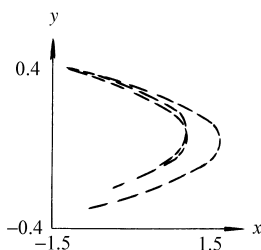
迭代映射 iteration map 离散时间系统 $x_{i+1} = F(x_i)$，这是一种迭代映射关系，点 x_{i+1} 就是点 x_i 的映象。

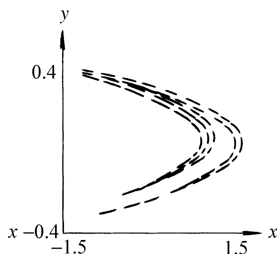
不动点 fixed point 满足 $\boldsymbol{x} = F(\boldsymbol{x})$ 的点称为不动点。

不动点映射 fixed point map $x_f = F(x_f)$ 称为不动点映射，式中 x_f 是方程 $x_{i+1} = F(x_i)$ 的不动点。

奈马克映射 Neimark map 奈马克映射是一种二维映射：$\begin{cases} x_{i+1} = F(x_i, y_i) \\ y_{i+1} = G(x_i, y_i) \end{cases}$，线性化后不动点的本征值位于 Z 平面上。平面上的单位圆是不动点稳定与否的本征值的边界。由本征方程 $\lambda^2 - (a + d)\lambda + ad - bc = \lambda^2 - T\lambda + D = 0$，得到本征值 $\lambda_{1,2} = (T \pm \sqrt{T^2 - 4D})/2$，可以定出在 T-D 平面上本征值使不动点稳定的条件：三条直线 $D = 1$，$T + D = -1$，$T - D = 1$ 所围的三角形。

埃农映射 Hénon map $\begin{cases} x_{i+1} = y_i + 1 - \mu x_i^2 \\ y_{i+1} = \eta x_i \end{cases}$ 称为埃农映射，它有两个不动点：$x_{f_{1,2}} = \dfrac{\eta - 1 \pm \sqrt{(\eta - 1)^2 + 4\mu}}{2\mu}$，$y_{f_{1,2}} = \eta x_{f_{1,2}}$。该映射在一定的参数条件下会出现周期轨道，也会出现混沌。





埃农混沌吸引子

（左图是迭代 200 次的结果，右图为迭代 3000 次的结果）

逻辑斯蒂映射 logistic mapping $x_{i+1} = \mu x_i(1 - x_i)$ 称为逻辑斯蒂映射，在群体生物学中，用作种群数量模型（也叫虫口模型或宏观经济模型）。x_i 代表某个种群第 i 代的总数量，且用该种群最大数量来归一化。这种映射在拓扑上属于单峰映射。

平方映射 square mapping $x_{i+1} = 1 - \mu x_i^2$ 称为平方映射，它是一维映射，由埃农映射在 $\eta = 0$ 时得到，它也是一种单峰映射。

斯梅尔映射 Smale map 斯梅尔映射是一种二维迭代映射，也称马蹄映射。它不产生混沌，而是一种混沌前的过渡。映射方法如下：作一正方形 S，将其纵向伸展 $\mu(>2)$ 倍，横向伸展 $\eta(<1/2)$ 倍，然后弯成竖向马蹄状，再与原正方形叠合，该叠合部分有两条纵向的阴影，这是一次正映射。按此做法，可得 2^n 条纵向的阴影，这是 n 次正映射。若将原正方形纵向压缩 $\mu(>2)$ 倍，横向压缩 $\eta(<1/2)$ 倍，然后弯成横向马蹄状，再与原正方形叠合，该叠合部分有两条横向的阴影，这是一次逆映射。同理可得 n 次逆映射。把上述两种结构叠合起来，就得到正方形 S 内的不变集：$I = I^+ \cap I^- = \bigcap_{i=-\infty}^{\infty} f^i(S)$。

圆映射 circle mapping $\varphi_{i+1} = \varphi_i + \dfrac{K}{2\pi}\sin(2\pi\varphi_i) + \omega$ 称为圆映射，它对角度呈周期性，参数 K 和 ω 是受迫振荡的幅度和频率。

标准映射 standard mapping 标准映射可以作为一种原型来研究保守系统中从规则运动到混沌系统的过渡，映射方程：

$$J_{n+1}=J_n+K\sin\theta_n$$
$$\theta_{n+1}=\theta_n+J_n+K\sin\theta_n$$

式中 $K>0$，J 和 θ 称为作用和角度变量。不动点是 $J=2m\pi$ 和 $\theta=0,\pi(m=0,\pm1,\cdots)$，对每个 m，都有两个不动点：θ_+ 和 θ_-。

茹利亚集 Joulia set 复数逻辑斯蒂映射 $z_{i+1}=z_i^2+C$，对固定的复控制参数，所有的 i 都有界的相空间内点集的边界称为茹利亚集。

芒德波罗集 Mandelbrot set 在茹利亚集中，将复控制参数在控制空间中形成的点集 $\{C_R, C_I\}$ 叫做芒德波罗集。它是一个连通集，结构非常复杂。可以用复数逻辑斯蒂映射 $z_{i+1}=z_i^2+C$，由 $z_0=0$ 开始，取 C 值进行迭代，凡收敛者均以黑式表示，于是得到芒德波罗集的图形。

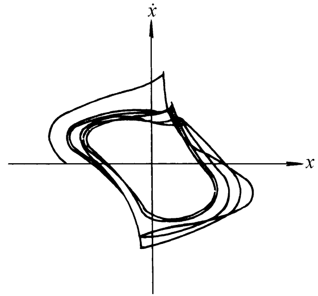


芒德波罗集

混沌运动 chaos movement 混沌是一种运动状态，是在确定性系统中出现的无规性，其主要特征是动力学特性对初始条件的依赖性非常敏感。一个混沌系统既是确定的又是不可预测的，也不能分解为两个子系统。

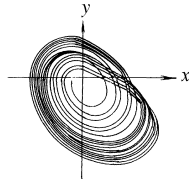
混沌吸引子 chaos attractor 也称奇异吸引子。它具有分形性质。

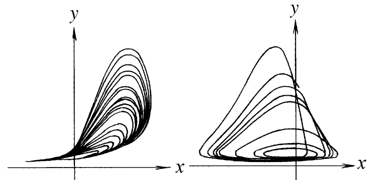
伯克霍夫-肖混沌吸引子 Brikhoff-Shaw chaos attractor 由含有非线性阻尼和非线性恢复力的二阶非线性受迫运动方程，可以得到伯克霍夫-肖混沌吸引子，它的特点是吸引子表面"支离破碎"，有不能同时消失的"侧翼"，表面维数非整数，大于 2 而小于 3。在庞加莱截面上，当控制参数改变时，吸引子会发生不可捉摸(blue sky)突变。



混沌吸引子的状态轨迹，在轨迹不连续处吸引子出现侧翼

勒斯勒尔混沌吸引子 Rössler chaos attractor 由勒斯勒尔方程
$$\begin{cases}\dot{x}=-y-z\\ \dot{y}=x+ay\\ \dot{z}=b+z(x-c)\end{cases}$$
可得勒斯勒尔混沌吸引子。这是一个带状吸引子，它由两个鞍型螺旋平衡点构成。控制参数 c 起非线性折叠效应"开关"的阈值作用，使一个螺旋的"流出"成为另一个螺旋的"流入"，在适当的参数值时，产生多种带状混沌吸引子。折叠效应使相轨迹层层相叠(不重合)。

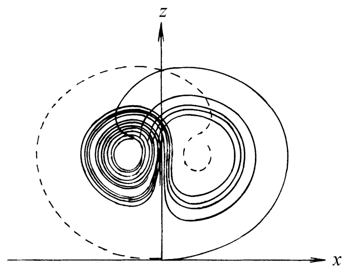




三个平面中的状态轨迹

洛伦兹混沌吸引子 Lorenz chaos attractor

根据洛伦兹方程
$$\begin{cases}\dot{x}=-\sigma(x-y)\\ \dot{y}=rx-y-xz\\ \dot{z}=-bz+xy\end{cases}$$
可作出洛伦兹混沌吸引子。b 是所研究流体的形状参数，r 是相对瑞利数，σ 乃普兰德尔数。当固定 b 和 σ 而改变 r 由小于 1 经过 1 时，流体由热传导变为热对流，平衡点由一个(原点，稳定结型点)变为三个(原点变为鞍型点，另外两个是对称的稳定结型点)。随着相对瑞利数的增大，稳定的结型点变为稳定的焦型点，接着产生同宿分岔、异宿分岔、霍普夫分岔，两稳定的焦型平衡点变为不稳定的螺旋型鞍点，状态轨迹在三个不稳定的平衡点之间运动，形成洛伦兹混沌吸引子。这时流体呈湍流运动状态，相轨迹也是层层相叠。



在 x-z 平面中相轨迹的运动情形

不可捉摸突变 blue sky catastrophe 当混沌吸引子 A 分岔出另一吸引子 B 时，在同一控制阈值，B 突然出现而 A 消失，B 可以存在下去，或者根本不存在，不论那种情形，分岔总是以吸引子 A 的消失而出现，这种突变叫不可捉摸突变，含有不可思议、意外的意思，它仅发生于微分方程的混沌吸引子。

量子混沌 quantum chaos 在量子力学中，系统状态一般用波函数和能量本征值来描述，因而在研究初始条件微扰的敏感性概念等问题时，希望用波函数和能量本征值的一些特征来区别规则运动和混沌运动。诸如此类的问题，有时不作严格的系统论述，归之于量子混沌。令 $\hat{H}=\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ 是系统的哈密顿，它的经典极限是 $H=H(p,q)$。经典极限哈密顿 H 所给出的动态混沌意味着哈密顿 $\hat{H}$ 的量子性质。

KAM 定理 Kolmogorov-Arnold-Moser theorem 令 Q 是 R^n 的开集，$H_1(\boldsymbol{J},\theta,\varepsilon)$ 乃对所有 $\boldsymbol{J}\in Q$，$0\leqslant\theta_i\leqslant 2\pi$ 的 $(\boldsymbol{J},\theta,\varepsilon)$ 实解析函数，且对每个 $\theta_1,\cdots,\theta_N$ 有周期 2π，且 ε 接近于零；$H_0(\boldsymbol{J})\equiv H(\boldsymbol{J},\theta,0)$ 独立于 θ；若对 $\boldsymbol{J}\in Q$ 有

$$\left|\partial^2 H_0(\boldsymbol{J})/\partial J_k\partial J_i\right|\neq 0$$

相应的频率 $\omega(\boldsymbol{J})=\partial H_0/\partial\boldsymbol{J}$ 对所有的向量 $|\boldsymbol{k}|=|k_1|+\cdots+|k_N|\geqslant 1$ 满足 $|\boldsymbol{k}\cdot\omega|\geqslant C|\boldsymbol{k}|^{-M}$，则对足够小的 ε，近可积系统的哈密顿表示

$$H=H_0(\boldsymbol{J})+\varepsilon H_1(\boldsymbol{J},\theta)\quad(\boldsymbol{J},\theta\in R^N)$$

在 $\theta'=\theta+\boldsymbol{f}(\theta,\varepsilon)$ 和 $\boldsymbol{J}'=\boldsymbol{J}+\boldsymbol{g}(\theta,\varepsilon)$ 定义的“不变环面”上有解。$\boldsymbol{f}$ 和 $\boldsymbol{g}$ 乃对每个 $\theta_1,\cdots,\theta_N$ 有周期 2π 的 ε 和 θ 的实解析函数，且在 $\varepsilon=0$ 时为零。在这些环面上，满足

$$\theta'_k=\omega_k\equiv\partial H_0/\partial I_k\quad(k=1,\cdots,N)$$

当 $\varepsilon\to 0$ 时，几乎对所有的频率，微扰系统的不变环面存在，并靠近未受微扰系统的不变环面。

四、分 形
Fractal

分形 fractal 分形是一集合，其豪斯多夫维严格超过拓扑维。拓扑维总是整数，豪斯多夫维可能有非整数。

豪斯多夫维 Hausdorff dimension 令 $A\subset R^n$，σ 是半径为 $r_1,r_2,\cdots$ 的可数球的覆盖，它们满足 $0<r_n<\delta/2$，令 $d>0$，对不同的覆盖 δ 考虑总和 $\sum r_n^d$，$\mathrm{Inf}\sum r_n^d$ 表示对所有满足上述条件的总和采用的最小值(总和的最大低限)。在极限 $\delta\to 0$ 时，若 $d<D_H$，总和将发散，$d>D_H$，总和将为零，而 $d=D_H$(D_H 不一定是整数)，极限将存在。D_H 称为集合 A 的豪斯多夫维(也称分形维)。

盒维 box dimension 用可数的边长为 δ 的小立方体(也称盒子)覆盖集合，计算盖满集合的最少盒子数(该数值乃盒子大小的函数)，由此来渐近盒子数目 $N(\delta)$ 的极限 $a\delta^{-D_B}$(a 为某个常数)，其中的 D_B 叫盒维。

关联维 correlation dimension 用数据构成一维数足够高的 m 维空间(叫做嵌入空间),使吸引子在其中,且不受约束,然后选定时间延迟 $\tau = p\Delta\tau$(p 为整数),形成 m 维向量集合,其分量取自序列 $z_i = (x_i, x_{i+p}, \cdots, x_{i+(m-1)p})$,$i = 1,2,\cdots$,取 M 个向量(一般 $M < N$,N 足够大),测量两个向量间的距离(距离定义采用:$\max_k |z_{ik} - z_{jk}|$,$k = 1,2,\cdots,m$,即相应分量的最大距离决定了两向量的距离)。如果该距离小于预置数 ε,则说此两向量关联,否则不关联。计数 M 个向量中关联的对数,并用 M^2 标称化:

$$C(\varepsilon) = \frac{1}{M^2}\sum_{i,j=1}^{M} H(\varepsilon - |z_i - z_j|)$$

($H(x)$是亥维赛德函数),于是定义关联维:

$$D_C = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\lg C(\varepsilon)}{\lg \varepsilon}$$

信息维 information dimension 令覆盖奇异集的非空盒(即小立方块)的总数为 $N(\delta)$,而 $N_i(\delta)$ 是第 i 种盒子的数目,因而这种盒子的概率就是 $P_i(\delta) = N_i(\delta)/N(\delta)$。取对数测度 $I(\delta) = -\sum_{i=1}^{n} P_i(\delta)\lg P_i(\delta)$,于是得到信息维:

$$D_1 = \lim_{\delta\to 0}\frac{I(\delta)}{\lg\delta} = -\lim_{\delta\to 0}\frac{\sum_{i=1}^{n} P_i(\delta)\lg P_i(\delta)}{\lg\delta}$$

分形布朗运动 fractal Brownian movement 在自然界中,分子、大分子、病毒、粒子等都由于热涨落而以随机碰撞的形式不停地运动,这种运动称为布朗运动。布朗运动的粒子位置是时间的随机函数,对归一化独立高斯随机过程 $\langle\xi\rangle$,布朗粒子的位置增量是 $H(0 < H < 1$,称为赫斯特指数)的函数,对寻常布朗运动 $H = 1/2$,当它不等于 $1/2$ 时,这时的布朗运动就叫做分形布朗运动。

康托尔集 Cantor set 在 $0 < D_H < 1$ 范围内有分形维的分形集称为康托尔集。下图是一个例子,它的分维数是 $\ln2/\ln3$。



康托尔集例子

自仿射 self-affine 由不同因子标度时间和距离的变换称为仿射变换。在一个仿射变换下,重现曲线,叫做自仿射。

五、逆散射变换 *Inverse Scattering Transform*

KdV 方程 KdV equation 考特维克·德佛里于 1895 年导出了弱非线性浅表水波的运动方程:

$$\frac{\partial\eta}{\partial t} = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{g}{h}}-\left(\eta\frac{\partial\eta}{\partial x}+\frac{2}{3}\frac{\partial\eta}{\partial x}+\frac{1}{3}\sigma\frac{\partial^3\eta}{\partial x^3}\right)$$

式中 η 是浅表水波幅度,h 乃水道深度,g 为重力加速度,$\sigma = h^3/3 - Th/g\rho$,$\rho$ 是水的密度,T 为表面张力。经变量代换 $t' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{g}{h\sigma}}t$、$x' = -\frac{x}{\sqrt{\sigma}}$、$u = -\frac{1}{2}\eta - \frac{\alpha}{3}$($\alpha = 1$)后,上述方程变为:

$$u_t - 6uu_x + u_{xxx} = 0$$

这就是 KdV 方程。

孤立子 soliton 孤立波发现于 1844 年,当在运河中的船舶突然停驶时,其两舷的水流会在船首堆起,继续向前,而其形状和幅度均保持不变,这种波称为孤立波。孤立波一般定义为 KdV 方程的 sech 平方解。孤立子是孤立波

的一种叫法，它不是一个精确的定义，但可以用来描述非线性方程的解：1）表示形状恒定的波；2）在无限远处，其增长或衰减不变；3）与其他孤立子交会之后保持原有形状。

缪拉变换 Miula transformation $u=\frac{\partial v}{\partial x}+v^2$ 称为缪拉变换，式中 v 是 KdV 方程的解，而 u 则是一种变形 KdV（mKdV）方程的解。若令

$$v=\frac{1}{\psi(x,t)}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}$$

再将 $u(x,t)$ 用 $u(x,t)-\lambda$ 代替（λ 为常数），则缪拉变换式就变成一维定常薛定谔方程：

$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+[\lambda-u(x,t)]\psi(x,t)=0$$

散射参量 scattering parameter 对一已知的势函数，所有束缚态本征值 λ_n、归一化常数 c_n（幅度的测度）以及连续函数 $a(k)$（透射系数）和 $b(k)$（反射系数）的集合称为散射参量。

逆散射变换 inverse scattering transformation 对定常薛定谔方程，势函数 $u(x,t)$ 满足 KdV 方程，且 $\lim_{|x|\to\infty}u(x,t)=0$。求得全部散射参量 $c_n(t)=c_n(0)e^{4k_n^3t}$，$b_n(k_n,t)=b_n(k_n,0)e^{8k_n^3t}$，$a_n(k_n,t)=a_n(k_n,0)$，对 $\psi(x,t)$ 的时间演化方程，用条件 $d\lambda/dt=0$，解盖尔芬德-莱维坦-马尔琴柯积分方程：

$$K(x,y,t)+B(x+y,t)+\int_{-\infty}^{\infty}B(y+z,t)K(x,z,t)dz=0$$

（式中定义 $B(\xi)=\sum_{n=1}^{N}c_n^2e^{-k_n\xi}+\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}b(k)e^{-k\xi}dk$）。若 $K(x,y)$ 可解得，则势函数为：

$$u(x,t)=-2\frac{dK(x,x,t)}{dx}$$

上述过程就叫做逆散射变换

正弦戈尔登方程 sine-Gordon equation 正弦戈尔登方程 $\frac{\partial^2u}{\partial t^2}-\frac{\partial^2u}{\partial t^2}+\sin u=0$ 是一种重要的非线性方程，它经常出现在微分几何与相对论场论中。它的行波解是 $u(x,t)=u(x-vt)=f(z)=\pm4\arctan[e^{\pm(z-z_0)/\sqrt{1-v^2}}]$。该解对变量 x 的一次导数会得到孤立子形状。e 指数取正号叫扭结解；取负号叫反扭结解。纽结和反纽结表示了孤立子碰撞的全部性质：孤立子发生碰撞后不受损失而仅有相移。

非线性薛定谔方程 nonlinear Schrödinger equation $j\frac{\partial\psi}{\partial t}+\Delta_d\psi+\psi|\psi|^{2\sigma}=0$ 是 d 维 σ 阶非线性薛定谔方程，其中 Δ_d 乃 d 维拉普拉斯算符，$j=\sqrt{-1}$。对每个 d 都能找到一个在有限时间内爆发（或自聚焦奇异性）的 σ。所谓"自聚焦"，乃指在适当的初始条件下，当能量小于零时会导致惯量矩在有限时间内消失（在守恒律意义上），结果形成坍缩（爆发）。

贝克隆变换 Bäcklund transformation 令 $u(x,t)$ 是偏微分方程 $D_1(u)=0$ 的解；$v(x,t)$ 是偏微分方程 $D_2(v)=0$ 的解。偏微分关系

$$B_i(u,v)=0\qquad(i=1,2,\cdots,n)$$

称为贝克隆变换。

Computational Physics
计算物理学

计算物理学 computational physics 在物理学的研究中，研究人员必须要建立一种计算方法，在物理学理论中，所谓计算方法是指一个物理系统的数学公式及其解。在经典力学和电动力学中，许多数学物理学家已为我们发展了一系列的运动定律和方程，量子力学为我们提供了微观粒子的运动定律，原则上物理学家能够定量地解出一个系统的动力学行为。然而，我们感兴趣的物质世界不是由几个，而是由大量的“基本粒子”所组成，这里“基本粒子”可能是银河系中的星星，凝聚态物理中的原子或离子，或者是等离子体中的电子等等。往往有这种情况，就是我们所感兴趣的系统其运动原理已为人们所熟知，但实际上它们是无法解出的，因而对它们了解甚微。例如我们能解析地解出单体或二体问题，但对三体以上问题实际上是无法解出的，因此在很多情况下，一组公式或者其形式解可以被建立起来，但是其数值结果却无法求得，因此必须引入近似。例如当一高能电子入射到一介质中时，它会在介质中产生库仑散射，韧致辐射，电子对产生，康普顿散射和电离等过程即簇射过程，虽然每一种过程都是已知，但是要进行详细的计算并与实验相比较则是无法进行。借助于目前的高速计算机，我们得以模拟其整个过程，不但可以得到电子的多次簇射的平均结果，而且还可以得到其涨落的信息，这种涨落信息在解析计算中是无法得到的，这种模拟过程也可以用到其他问题上去。从另一种角度来讲，这种模拟过程可以看作是实验的一种替代，有时被人们称为“计算机实验”，这种“计算机实验”有很大的优点，它可节省大量的人力、物力和时间。计算机甚至还可以做人们所无法在实验室进行的“实验”，例如体积太大或时间太长等等。

由于计算机技术的飞快发展，计算物理能解决的问题也愈来愈广。目前计算物理已在物理学中扮演了一个重要的角色。

一、代数方程的解
Solutions of Algebraic Equations

二次三次代数方程的解 solutions of quadratic and cubic equations
二次方程：

$$ax^2+bx+c=0;\quad a\neq 0 \tag{1}$$

的两个解分别为

$$x_{1,2}=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \tag{2}$$

三次代数方程：

$$x^3+bx^2+cx+d=0 \tag{3}$$

用一变量替换：

$$x=y-\frac{b}{3} \tag{4}$$

得

$$y^3+py+q=0 \tag{5}$$

这里

$$p=c-\frac{b^2}{3}$$

$$q=d-\frac{bc}{3}+\frac{2b^3}{27}$$

我们设

$$y=u+v$$

则

$$y^3=u^3+v^3+3uv(u+v)=u^3+v^3+3uvy$$

因此

$$y^3-3uvy-(u^3+v^3)=0 \tag{6}$$

比较(5)与(6)式得：

$$3uv=-p,\quad u^3+v^3=-q$$

也就是说

$$\begin{cases} u^3v^3=-\dfrac{p^3}{27} \\ u^3+v^3=-q \end{cases} \tag{7}$$

因此 u^3 和 v^3 为下面二次方程的两个解：

$$z^2+qz-\frac{p^3}{27}=0$$

即

$$\begin{cases} u^3 = \dfrac{-q + \sqrt{q^2 + \dfrac{4p^3}{27}}}{2} \\ v^3 = \dfrac{-q - \sqrt{q^2 + \dfrac{4p^3}{27}}}{2} \end{cases}$$

要求出 y,必须求 u^3 和 v^3 的立方根,设

$$\alpha = \sqrt[3]{\frac{-q + \sqrt{q^2 + \dfrac{4p^3}{27}}}{2}}$$

$$\beta = \sqrt[3]{\frac{-q - \sqrt{q^2 + \dfrac{4p^3}{27}}}{2}}$$

而 $x^3=1$ 的三个根为:

$$1,\ \omega = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i \text{ 和 } \omega^2 = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}i$$

则 y 的三个解为

$$y_1 = \alpha + \beta,\ y_2 = \omega\alpha + \omega^2\beta,\ y_3 = \omega^2\alpha + \omega\beta$$

四次方程的解 solutions of quartic equations

与三次方程一样,四次方程:

$$x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 = 0 \quad (1)$$

经过 $x = y - \dfrac{a_3}{4}$ 的变换后可把 x^3 的系数消去,因此不失一般性,我们可把一般四次代数方程写成:

$$x^4 + px^2 + qx + r = 0 \quad (2)$$

如果我们能用配方法将(2)式变为

$$(x^2 + a)^2 = b(x + c)^2 \quad (3)$$

则此四次方程可分解为两个二次方程:

$$\begin{cases} x^2 + a = \sqrt{b}(x + c) \\ x^2 + a = -\sqrt{b}(x + c) \end{cases} \quad (4)$$

将此式展开得:

$$x^4 + (2a - b)x^2 - 2bcx + (a^2 - bc^2) = 0 \quad (5)$$

对照(2)与(4)式得:

$$\begin{cases} 2a - b = p;\ b = 2a - p \\ -2bc = q;\ c = -\dfrac{q}{2b} \\ a^2 - bc^2 = r \end{cases} \quad (6)$$

把 b 与 c 代入式得:

$$8a^3 - 4pa^2 - 8ra + (4pr - q^2) = 0 \quad (7)$$

(7)式是 a 的三次方程,解此方程,取任一个解 a,就可求得 b 与 c。因此从(4)式可得到 x 的四个解。

高于四次的代数方程只能用数值方法解。

二、代数方程组的解

Solutions of Simultaneuos Algebraic Equations

代数方程组的数值解在计算物理中经常用到,代数方程组的数值解方法有许多种,我们这里介绍 Jacobi 法,Gauss-Seidel 法和 Chebyshev 法。

雅可比法 Jacobi method

求解代数方程组

$$Au = w$$

这里 A 位 $n \times n$ 矩阵,u 与 w 为 n 列向量。A 可以分解为对角矩阵 D,上三角矩阵 U 和下三角矩阵 L:

$$\underset{A}{\begin{bmatrix} x & x & x & \cdots & x \\ x & x & x & \cdots & x \\ \cdots & & & & \cdots \\ x & x & x & \cdots & x \\ x & x & x & \cdots & x \end{bmatrix}} = \underset{D}{\begin{bmatrix} x & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & x & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & & & & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots 0 & x \end{bmatrix}}$$

$$+ \underset{U}{\begin{bmatrix} 0 & x & x & \cdots & x \\ 0 & 0 & x & \cdots & x \\ \cdots & & & & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots 0 & x \\ 0 & 0 & 0 & \cdots 0 & 0 \end{bmatrix}} + \underset{L}{\begin{bmatrix} 0 & \cdots & & & 0 \\ x & 0 & \cdots & & 0 \\ \cdots & & & & \cdots \\ x & x & \cdots & x\ 0 & 0 \\ x & x & \cdots & x\ x & 0 \end{bmatrix}}$$

所以

$$Au = w \rightarrow (D + U + L)u = w$$

两边除以 D 得:

$$(1 + U' + L')u = D^{-1}w = w'$$

设

$$A' = I + U' + L'$$

则

$$A'u = w'$$

$$(I - A')u = u - w'$$

$$u = (I - A')u + w'$$

Jacobi 迭代为

$$u^{(p+1)} = [I - A']u^{(p)} + w'$$

其迭代精度为

$$\frac{\delta\varepsilon^{(p)}}{\varepsilon^{(p)}} = |\rho_m - 1|$$

ρ_m 是 B 矩阵的最大本征值。

高斯-塞德尔法 Gauss-Seidel method

公式

$$(I + U' + L')u = D^{-1}w = w'$$

可变为

$$(I + L')u = -U'u + w'$$

Gauss-Seidel 迭代为

$$(I + L')u^{(p+1)} = -U'u^{(p)} + w'$$

或

$$u^{(p+1)} = -(I + L')^{-1}U'u^{(p)} + (I + L')^{-1}w'$$

可以证明 Gauss-Seidel 迭代法其收敛速度大大快于 Jacobi 法。

切比雪夫法 Chebyshev's method 为了导出简单的迭代过程,我们设想其解随一虚拟时间的演化过程,即

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -A'u + w'$$

当 $\frac{\partial u}{\partial t}=0$ 时,则得方程本身的解,并取 $\Delta t=\omega$,则其迭代方程为

$$u^{(p+1)} = u^{(p)} - \omega A'u^{(p)} + \omega w'$$

或

$$u^{(p+1)} = (I - \omega A')u^{(p)} + \omega w'。$$

与 Gauss-Seidel 迭代相似,我们可得

$$(I + \omega L')u^{(p+1)} = (1 - \omega)Iu^{(p)} - \omega U'u^{(p)} + \omega w'$$

或

$$u^{(p+1)} = (I + \omega L')^{-1}\{(1 - \omega)I - \omega U'\}u^{(p)} + (1 + \omega L')^{-1}\omega u^{(p)}。$$

我们定义 u 为 u_0 和 u_1 两部分,同样 w 分为 w_0 和 w_1 两部分,从上面迭代法可得

$$u_\upsilon^{(p+1)} = -\omega(L' + U')u_{1-\upsilon}^{(p)} + (1 - \omega)u_\upsilon^{(p-1)} + \omega w_\upsilon'$$

这里 $\upsilon = 0, 1$,在 Chebyshev 法中我们取 $u_\upsilon^{(p+1)} = -\omega_p(L' + U')u_{1-\upsilon}^{(p)} + (1 - \omega_p)u_\upsilon^{(p-1)} + \omega_p\omega_\upsilon'$

这里

$\upsilon=0$;如果 p 是偶数

$\upsilon=1$;如果 p 是奇数

ω_p 的选择为

$$\omega_0 = 1$$

$$\omega_1 = 1\Big/\left(1 - \frac{1}{2}\mu_m^2\right)$$

当 $p\geqslant1$ 时,

$$\omega_{p+1} = 1\Big/\left(1 - \frac{1}{4}\mu_m^2\omega_p\right)$$

这里 μ_m 是 $(L' + U')$ 最大本征值模。

三、矩阵运算
Matrix Operation

矩阵的本征值与本征矢量 eigenvalues and eigenvectors of matrix 对于 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 如果有一非零矢量 $\boldsymbol{u}$ 满足

$$\boldsymbol{Au} = \lambda\boldsymbol{u} \tag{1}$$

则 λ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个本征值,$\boldsymbol{u}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的一个本征矢量;显然要使(1)有解,其充要条件是

$$\Phi(\lambda) = \det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = 0 \tag{2}$$

将方程(2)展开成 λ 的 n 次代数方程,则有

$$\Phi(\lambda) = (-1)^n(\lambda^n - \sigma_1\lambda^{n-1} + \cdots + (-1)^n\sigma_n) \tag{3}$$

解出了 λ 后代入(1)就可求得相应的 u。

矩阵的追迹 trace of matrix 设 $\boldsymbol{A}$ 为

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \hline a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

我们称对角线上元素之和为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的追迹,用 Tr 表示。

即:

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{4}$$

从本征方程的展开式可看出,对应于 $\boldsymbol{A}$ 有 n 个本征函数与本征矢量,其中某些本征值可能相同,但本征矢量都不一样。另外从(3)式可知

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{A}) = \sigma_1 = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{5}$$

和

$$\det(\boldsymbol{A}) = \sigma_n = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i \qquad (6)$$

矩阵函数的运算 matrix function operations 由 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个本征矢量组成的矩阵 $\boldsymbol{U}$,则有

$$U^{-1}\boldsymbol{A}U = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

设 a_0, a_1, a_n 为任何常数,$\boldsymbol{A}$ 为矩阵,定义

$$g(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=0}^{n} a_i \boldsymbol{A}^{n-i} \qquad (8)$$

如 $\boldsymbol{B}$ 为另一矩阵,则易证明:

$$g(B^{-1}AB) = \boldsymbol{B}^{-1} g(\boldsymbol{A}) \boldsymbol{B} \qquad (9)$$

当 $\boldsymbol{B}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 本征矢量组成的矩阵 $\boldsymbol{U}$ 时,则有

$$\boldsymbol{U}^{-1} g(\boldsymbol{A}) \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} g(\lambda_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & g(\lambda_2) & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & \cdots & g(\lambda_n) \end{bmatrix} \qquad (10)$$

在物理学中常会遇到如 $e^{-\beta H}$ 等算符,这是 H 是哈密顿算符。由于 $e^{\boldsymbol{A}}$ 定义为

$$e^{\boldsymbol{A}} = 1 + \boldsymbol{A} + \frac{\boldsymbol{A}^2}{2\,!} + \frac{\boldsymbol{A}^3}{3\,!} + \cdots + \frac{\boldsymbol{A}^n}{n\,!} + \cdots$$

所以(10)式对 $e^{-\beta H}$ 也适用。我们用海森堡模型

$$\boldsymbol{H} = J_x \boldsymbol{S}_i^x \cdot \boldsymbol{S}_j^x + J_y \boldsymbol{S}_i^y \cdot \boldsymbol{S}_j^y + J_z \boldsymbol{S}_i^z \cdot \boldsymbol{S}_j^z$$

为例。这里 J_x, J_y, J_z 为 x 方向,y 方向与 z 方向的互作用强度。i, j 为最近邻两个格点,而

$$\boldsymbol{S}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{S}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{S}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

为三个泡利矩阵。一般情况下

$$J_x = J_y$$

所以

$$\boldsymbol{H} = \begin{pmatrix} J_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J_z & 2J_x & 0 \\ 0 & 2J_x & -J_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_z \end{pmatrix}$$

我们可算出 βH 的四个本征值和本征向量

$$\lambda = \beta J_z, -\beta(J_z + 2J_x), -\beta(J_z - 2J_x), \beta J_z$$

和

$$\boldsymbol{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{U}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

因此利用(10)式得

$$e^{-\beta H} = \boldsymbol{U}^{-1} \begin{bmatrix} e^{-\beta J_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\beta(J_z+2J_x)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{\beta(J_z-2J_x)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta J_z} \end{bmatrix} \boldsymbol{U}$$

$$= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-\beta J_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\beta(J_z+2J_x)} + e^{\beta(J_z-2J_x)} & -e^{\beta(J_z+2J_x)} + e^{\beta(J_z-2J_x)} & 0 \\ 0 & -e^{\beta(J_z+2J_x)} + e^{\beta(J_z-2J_x)} & e^{\beta(J_z+2J_x)} + e^{\beta(J_z-2J_x)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-\beta J_z} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{2} e^{-\beta J_z} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{\beta J_z} \cdot \mathrm{ch}(2J_x) & -e^{\beta J_z} \cdot \mathrm{sh}(2J_x) & 0 \\ 0 & e^{\beta J_z} \cdot \mathrm{sh}(2J_x) & e^{\beta J_z} \cdot \mathrm{ch}(2J_x) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2} e^{-\beta J_z} \end{bmatrix}。$$

四、常微分方程(组)的解
Solutious of Ordinary Differential Equations

在下面的讨论中 t, u 和 f 均可看作是一维或多维的矢量,如 u 和 f 大于一维就是微分方程组,应用矩阵法进行运算。常微分方程(组)在物理学的计算中经常用到,在一般情况下常微分方程(组)是无法用解析法直接解出,因而必须借助数值近似法。常微分方程的数值近似法有许多,我们这里介绍欧拉(Euler)法。

欧拉法 Eulerian Method

对于给定的常微分方程

$$\frac{du}{dt}+f(u,t)=0$$

这里 $u=u(t)$是 t 的函数,其初值条件为

$$u(t^0)=u^0$$

对微分方程积分得

$$u(t)=u(t^0)-\int_0^t f(u,t)dt$$

要解 $u(t)$在一串点, $t^1, t^2, ..., t^n$ 上的值, $u^1, u^2, ..., u^n$

从形式上可从积分中得

$$u^{n+1}=u^n-\int_n^{n+1} f(u,t)dt$$

设 $\Delta t=t^{i+1}-t^i$ 为常数,当 Δt 足够小时,$f(u,t)$在 $t^i\to t^{i+1}$内可看作常数,则 $f(u^i,t^i)=f^i$,因此,

$$u^{i+1}=u^i-f^i\Delta t$$

可以证明,欧拉法的精度为

$$\varepsilon=0(\Delta t)$$

蛙跳法 leapfrog method 把欧拉法改进,将 $f(u,t)$的值近似值从起点 f^i移至中间点 f^{i+1},也就是

$$u^{i+1}=u^{i-1}-f(u^i,t^i)2\Delta t$$

$$u^{i+2}=u^i-f(u^{i+1},t^{i+1})2\Delta t$$

从 u^{i+1}和 u^{i+2}可推出 u^{i+3}等等,可以证明它的精度为

$$\varepsilon=0(\Delta t^2)。$$

显式二级法 explicit second order method 显式二级法可以得到比蛙跳法更高的精度,因此应用更广。它的思想是把积分 $\int_n^{n+1} f dt$ 用两级欧拉过程来完成,即经行一次辅助计算,在 $t^{n+\frac{1}{2}}$时算出 $u^{n+\frac{1}{2}}$,

$$u^{n+\frac{1}{2}}=u^n-f(u^n,t^n)\frac{\Delta t}{2}$$

再经行计算

$$u^{n+1}=u^n-f\left(u^{n+\frac{1}{2}},t^{n+\frac{1}{2}}\right)\Delta t。$$

从式中可知, $u^{n+\frac{1}{2}}$用 u^n 进行线性外推至 $t^{n+\frac{1}{2}}$点,其精度为

$$\varepsilon=0(\Delta t^2)$$

隐式二级法 implicit second order method 隐式二级法是用 f 在 t^n 点和 t^{n+1}点的平均值来代替 f,即

$$u^{n+1}=u^n-f(u^n,t^n)\Delta t$$

和

$$u^{n+1}=u^n-\left\{f(u^n,t^n)+f(u^{n+1},t^{n+1})\right\}\frac{\Delta t}{2}$$

它的精度同样为

$$\varepsilon=0(\Delta t^2)$$

解高阶线性微分方程的算符法 solutions of high order linear differential equations by operator method 设有一线性微分方程

$$\frac{d^n y}{dx^n}+a_1\frac{d^{n-1}y}{dx^{n-1}}+a_2\frac{d^{n-2}y}{dx^{n-2}}+\cdots+a_{n-1}\frac{dy}{dx}+a_n y=f(x) \quad (1)$$

这里 a_i 是任意常数,为了鉴定起见,我们引入新符号(算符)D

$$\frac{dy}{dx}\equiv Dy;\frac{d^n y}{dx^n}\equiv D^n y$$

因此(1)式变为

$$D^n y+a_1D^{n-1}y+a_2D^{n-2}y+\cdots\cdots+a_{n-1}Dy+a_n y=f(x)$$

或

$$(D^n+a_1D^{n-1}+a_2D^{n-2}+\cdots\cdots+a_{n-1}D+a_n)y=f(x) \quad (2)$$

当 $f(x)=0$ 时,则有

$$(D^n+a_1D^{n-1}+a_2D^{n-2}+\cdots\cdots+a_{n-1}D+a_n)y=0 \quad (3)$$

我们把括号中的 D^n 次函数分解因式得：

$$(D-m_1)(D-m_2)\cdots\cdots(D-m_n)y=0 \quad (4)$$

这里$(D-m_i)$算符可以互易，因此方程

$$(D-m_i)y=\frac{dy}{dx}-m_iy=0 \quad (5)$$

的解：

$$y=e^{m_ix}$$

为方程(3)的一个解。因此如果 m_i 互不相同，则(3)的一般解为

$$y=C_1e^{m_1x}+C_2e^{m_2x}+\cdots\cdots+C_ne^{m_nx} \quad (6)$$

如果有两个 m_i 相等：$m_1=m_2=m$，即

$$(D-m)(D-m)y=0 \quad (7)$$

很容易验证，$v=e^{mx}$就是它的一个解。为求另一个解，设 $y=uv$，代入(7)式得：

$$u(D^2v-2mDv+m^2)+v^2Du$$
$$+2Du\cdot Du-2mvDu=0$$

将 $v=e^{mx}$代入上式得：

$$vD^2u=0$$

因 $v\neq0$，所以

$$D^2u=0,\quad 即\quad u=C_1+C_2x$$

即

$$y=e^{mx}(C_1+C_2x)$$

对于有 r 个重根的情况，同样可证明：

$$y=e^{mx}(C_1+C_2x+\cdots\cdots+C_rx^{r-1}) \quad (8)$$

现在我们回到方程(2)的解。我们知道它的一般解是其对应的齐次方程(3)的一般解加上非齐次方程(2)的一个特殊解。为求非齐次方程(2)的特解，我们先考虑一最简单情况

$$(D+a)y=f(x)$$

我们知道其特解为

$$y=e^{-ax}\int e^{ax}f(x)dx$$

也就是说：

$$\frac{1}{D+a}f(x)=e^{-ax}\int e^{ax}f(x)dx$$

在一般情况下，方程(2)的一个特解为：

$$y=\frac{1}{D-m_1}\cdot\frac{1}{D-m_2}\cdots\cdots\frac{1}{D-m_n}\cdot f(x) \quad (9)$$

也就是

$$y=e^{m_1x}\int e^{(m_2-m_1)x}\int e^{(m_3-m_2)x}\cdots\cdots$$
$$\int e^{-m_nx}f(x)(dx)^n \quad (10)$$

另一解法是把(9)式右边用部分分式法分解为

$$y=\left[\frac{A_1}{D-m_1}+\frac{A_1}{D-m_2}+\cdots\cdots+\frac{A_1}{D-m_n}\right]f(x)$$

因此：

$$y=A_1e^{m_1x}\int e^{-m_1x}f(x)dx+A_2e^{m_2x}\int e^{-m_2x}f(x)dx$$
$$+\cdots\cdots+A_ne^{m_nx}\int e^{-m_nx}f(x)dx \quad (11)$$

另外有

$$\frac{f(x)}{D^2+a^2}=\frac{1}{a}\left\{\sin(ax)\int\cos(ax)\cdot f(x)dx\right.$$
$$\left.-\cos ax\int\sin ax\cdot f(x)dx\right\}$$

$\dfrac{f(x)}{(D^2+a^2)^s}$将上式重复 s 次。

对 $f(x)=e^{ax}$有

$$\frac{f(x)}{F(D)}=\frac{e^{ax}}{F(D)}=\frac{1}{F(a)}e^{ax}$$

对

$f(x)=\sin(\alpha x+\beta)$，或 $f(x)=\cos(\alpha x+\beta)$ 化：

$$F(D)=\varphi(D^2)$$

则

$$\frac{1}{F(D)}\sin(\alpha x+\beta)=\frac{1}{\varphi(D^2)}\sin(\alpha x+\beta)$$
$$=\frac{1}{\varphi(-\alpha^2)}\sin(\alpha x+\beta)$$

和

$$\frac{1}{F(D)}\cos(\alpha x+\beta)=\frac{1}{\varphi(-\alpha^2)}\cos(\alpha x+\beta)$$

对

$$f(x)=e^{ax}\Psi(x)$$

有

$$\frac{1}{F(D)}e^{ax}\Psi(x)=e^{ax}\frac{1}{F(D+a)}\Psi(x)$$

五、偏微分方程及其解

Partial Differential Equations

波与波动方程 wave and wave equatious 我

们考虑三维空间中的波动方程的初值问题

$$\nabla^2 u - \frac{1}{a^2} u_{tt} = 0,$$

$$u(M,0) = \varphi(M);$$

$$u_t(M,0) = \psi(M)$$

这里

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t},$$

$$u_{tt} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$

其中 M 代表空间任意一点，$u(M,t)$是一个四元函数，对于一维的波动方程

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0,$$

它的特征方程为

$$\frac{dx}{dt} = \pm c$$

因此得两族实的特征线

$$x \pm ct = K$$

K 是任意常数，引进新变量

$$\xi = x - ct,$$

$$\eta = x + ct$$

方程变为

$$u_{\xi\eta} = 0$$

求积一次得

$$u_\xi = f(\xi)$$

这里 $f(\xi)$是 ξ 的任意函数，再求积一次得，

$$u = \int f(\xi) d\xi + G(\eta) = F(\xi) + G(\eta)$$

F 与 G 都是任意函数，

$$u(x,t) = F(x - ct) + G(x + ct)$$

设给定的初值为

$$u(x,0) = \varphi(x),$$

$$u_t(x,0) = \psi(x)$$

由普遍公式可得

$$\varphi(x) = F(x) + G(x)$$

$$\psi(x) = -cF'(x) + cG'(x)。$$

因此可得

$$u(x,t) = \frac{\varphi(x - ct) + \varphi(x + ct)}{2} + \frac{1}{2c}\int_{x-ct}^{x+ct} \psi(\lambda) d\lambda。$$

这就是波动方程的达朗贝尔（d'Alembert）解。

平均值方法（泊松公式） mean value (Poisson) method

$$u(M,t) = \frac{1}{4\pi a}\left[\frac{\partial}{\partial t}\iint_{S_{at}^M} \frac{\varphi}{r} dS + \iint_{S_{at}^M} \frac{\psi}{r} dS,\right.$$

其中 S_{at}^M表示以 M 为中心半径等于 at 的球面。

扩散方程（或热传导方程）：

扩散方程的形式为

$$u_t - \kappa \nabla^2 u = f$$

其初值条件为

$$u|_{t=0} = \varphi,$$

其边界条件为

$$\left[\alpha \frac{\partial u}{\partial n} + \beta u\right]_\Sigma = \psi$$

其中 α 和 β 都是大于或等于零的实数，但不同时为零，Σ 代表问题中的区域 G 的边界，n 代表 Σ 的外法线方向，可以证明扩散方程的解是惟一的。

椭圆方程 elliplical equations

在二阶线性偏微分方程中属于

$$u_{xx} + u_{yy} + \phi(x, y, u, u_x, u_y) = 0$$

的方程称为椭圆方程。一般地说，椭圆方程初值问题的解是不稳定的，例如下列初值问题

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$u(0,y) = 0$$

$$u_x(0,y) = A_n \sin(ny)$$

其中 A_n 当 n 很大时变为很小，如取 $A_n = \frac{1}{n_p}(p > 0)$，这个问题的解是

$$u = \frac{A_n}{n}\sin(ny)\mathrm{sh}(nx)$$

当 n 足够大时 $u_x(0,y)$可以小于任何数，可是只要 $x \neq 0$，u 恰随 n 增大，可见其解是不稳定的。

六、算符方程的近似解

Approximatic Solutions of Operator Functions

变分法 variational method　泛函求极值的

方法称为变分法,例如求在所有联结两定点 $A(x_0, y_0)$, $B(x, y)$ 的平面曲线中长度最小的曲线,也就是要在所有满足

$$y_0 = y(x_0), y_1 = y(x_1)$$

的可微函数类 $y = y(x)$ 中,求出使泛函

$$J[y] = \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{1 + y''} \mathrm{d}x$$

取最小值的那个函数,这就是泛函求极值问题,也就是变分问题。若曲线 $y = y(x)$ 给泛函

$$J[y(x)] = \int_{x_0}^{x_1} F(x, y, y') \mathrm{d}x \qquad (1)$$

以极值,则代表此曲线的函数 $y = y(x)$ 必满足微分方程(即泛函(1)的欧拉方程)。

$$F_y - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} F_{y'} = 0 \qquad (2)$$

即

$$F_y - F_{xy'} - F_{yy'} y' - F_{y'y'} y'' = 0 \qquad (3)$$

用变分原理我们来处理算符方程

$$Tu = f \qquad (4)$$

这里 T 为算符, u 为待求函数, f 为已知数。若方程有解,则此解必使泛函

$$J[u] = (Tu, u) - 2(f, u) \qquad (5)$$

取极小,反之使泛函(5)取极小的函数 u 必是算符方程(4)的解。这里我们定义内积 (f, g) 为

$$(f, g) = \int_b^a f(x) \cdot g(x) dx$$

有了欧拉方程,下面问题是如何求变分问题的极值函数。

里茨法 Ritz's method 若函数序列 $u_n(n = 1, 2\cdots)$ 满足

$$J(u_n) \to \min J[u] \quad (n \to \infty)$$

则称此序列为泛函 $J[u]$ 的极小化序列。Ritz 法求解算符方程的过程如下:

①利用变分原理将求解方程问题转化为变分问题

$$J[u] = (Tu, u) - 2(f, u) = \min$$

②在希尔伯特空间中找出 n 个线性无关的函数 $\{\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n\}$ 作为基函数,令

$$u_n = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i$$

当 $n = 1, 2, \cdots$,时,即构成极小化序列 u_n。将 u_n 代入上面"变分法"词条中泛函(5),取 n 为有限数,则有

$$\begin{aligned} J[u] \approx J[u_n] &= (Tu_n, u_n) - 2(f, u_n) \\ &= \left(T\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i \right) - 2\left(f, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^{n} \alpha_i \alpha_j (T\varphi_i, \varphi_j) - 2\left(f, \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i \right) \\ &= I(\alpha_1, \alpha_2 \cdots, \alpha_n) \end{aligned}$$

经过一系列内积运算,到此已成为 $\alpha_1, \alpha_2 \cdots, \alpha_n$ 的函数。

③根据多元函数极值理论,求出方程组:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial I}{\partial \alpha_1} = 0 \\ \dfrac{\partial I}{\partial \alpha_2} = 0 \\ \cdots \\ \dfrac{\partial I}{\partial \alpha_n} = 0 \end{cases}$$

的解。即

$$\begin{bmatrix} (T\varphi_1, \varphi_1), (T\varphi_2, \varphi_1) \cdots (T\varphi_n, \varphi_1) \\ (T\varphi_1, \varphi_2), (T\varphi_2, \varphi_2) \cdots (T\varphi_n, \varphi_2) \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ (T\varphi_1, \varphi_n), (T\varphi_2, \varphi_n) \cdots (T\varphi_n, \varphi_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f, \varphi_1) \\ (f, \varphi_n) \\ \cdots \\ (f, \varphi_n) \end{bmatrix} \qquad (1)$$

④从方程(1)解出 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$,则

$$u_n = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \varphi_i \qquad (2)$$

即为上面"变分法"中方程(4)的近似解。下面我们说明此种方法的应用。在 $x^2 + y^2 < a^2$ 内解泊松方程:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = -2$$

其边界条件为:

$$u = 0, \text{当 } x^2 + y^2 = a^2$$

这里我们取 $n = 2$,因此

$$u_2 = \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_2 \varphi_2$$

取两个线性无关的基函数

$$\varphi_1(x,y)=(a^2-x^2)(a^2-y^2)$$

$$\varphi_2(x,y)=(a^2-x^2)(a^2-y^2)(x^2+y^2)$$

我们可以求出方程(2)中的$(T\varphi_i,\varphi_j)(i,j=1,2)$和$(f,\varphi_i),(i=1,2)$,并得到

$$\alpha_1=\frac{1}{a^2}\frac{5\times7\times37}{8\times277},\alpha_2=\frac{1}{a^4}\frac{15\times35}{16\times277}$$

最后得到方程的近似解为

$$u\approx u_2=\alpha_1\varphi_1+\alpha_2\varphi_2$$

$$=\frac{1}{a^2}\frac{35}{16\times277}(a^2-x^2)(a^2-y^2)\left[74+\frac{15}{a^2}(x^2+y^2)\right]$$

有限单元法　finite element method　它以变分原理为基础,将能求解的微分方程转化为等价的变分问题。在具体方法上又采用了差分法的灵活的离散处理,通过分片插值求基克服了里茨(Ritz)法中寻找全域基的困难。

为了图形的简明,设待求函数为一元函数进行讨论。设算符方程 $Tu=f$ 的待求函数$u(x)$定义于区间$[a,b]$上,取任意离散点

$$a=x_1<x_2<\cdots\cdots<x_i<x_{i+1}<\cdots\cdots<x_n=b$$

对于每一个节点 x_i,构造基函数

$$N=\begin{cases}1 & x=x_i\\ \text{线性} & x\in(x_{i-1},x_{i+1})\\ 0 & x\notin(x_{i-1},x_{i+1})\end{cases}\qquad(1)$$

对应于每一个节点 x_i 都有一个基函数 N_i(见图1)。全域上共有 n 个节点,则共有 n 个基函数

$$N_1,N_2,\cdots\cdots,N_n$$

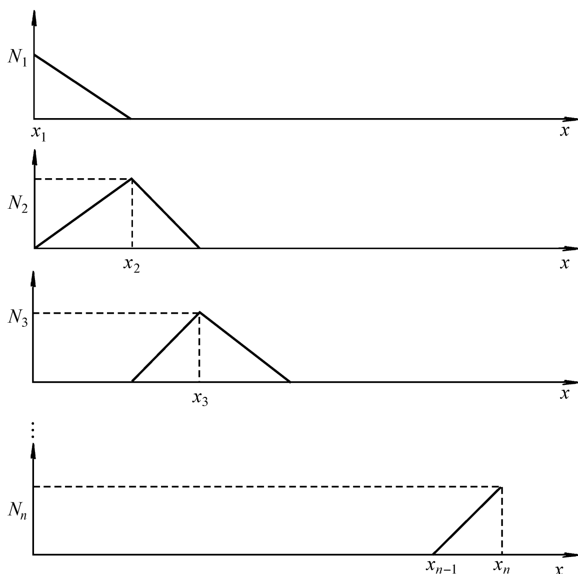


图1　一维情况下的基函数图

由于 $N_i(i=1,2,n)$之间线性无关,所以可以用它们为基函数张成一有限元子空间,因此我们可设

$$u_n(x)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_iN_i\qquad(2)$$

作为"变分法"词条方程(4)的近似解。

由于有限元基函数的特殊构造[见(1)式],每个基函数在对应节点上的值为1,而在其他节点上的值为0,故在近似解表达式(2)中的系数 $\alpha_1,\alpha_2\cdots,\alpha_n$ 正好就是近似解 $u_n(x)$在各离散点 $x_1,x_2,\cdots,x_n$ 处的函数值,于是 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$ 构成了待求函数的近似数值解。

若 u 为二元函数,则其定义域为平面场,下

面我们以二元函数为例说明有限单元法的解题步骤。

①根据变分原理,将求解的方程转化为变分问题,即求

$$Tu = f$$

变为求 u 使 $J[u]=(Tu,u)-2(f,u)=\min$

②对 $u(x,y)$的定义域进行有限分割,将全域离散成有限个单元的集合。图上所示为平面三角形剖分的情况。

设全域离散成 k 个单元 n 个节点,则全域上的泛函可离散成 k 个单元上的泛函之和

$$J[u] = \sum_{e=1}^{k} J^e \tag{3}$$

③分片插值求基:下面以平面三角形单元上作线性插值为例来说明分片插值求基的过程。在离散场中,任取一个 e 单元如图 2 所示。

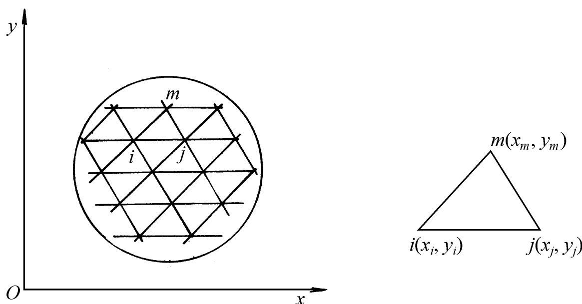


图 2 二维时的平面三角形剖分的情况

④在 e 单元上作线性插值,令

$$u^e(x,y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \tag{4}$$

其中 α_1,α_2 和 α_3 为待定系数。用 $i(x_i,y_i)$, $j(x_j,y_j)$和 $m(x_m,y_m)$表示 e 单元上三顶点,则 u^e 在三顶点上的函数值应为

$$\begin{aligned} u_i &= u^e(x_i,y_i) = \alpha_1 + \alpha_2 x_i + \alpha_3 y_i \\ u_j &= u^e(x_j,y_j) = \alpha_1 + \alpha_2 x_j + \alpha_3 y_j \\ u_m &= u^e(x_m,y_m) = \alpha_1 + \alpha_2 x_m + \alpha_3 y_m \end{aligned} \tag{5}$$

从上式可解出 α_1,α_2 和 α_3

$$\alpha_1 = \frac{\begin{vmatrix} u_i & x_i & y_i \\ u_j & x_j & y_j \\ u_m & x_m & y_m \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix}} = \frac{1}{2\Delta}(a_i u_i + a_j u_j + a_m u_m)$$

同理:

$$\alpha_2 = \frac{1}{2\Delta}(b_i u_i + b_j u_j + b_m u_m)$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2\Delta}(c_i u_i + c_j u_j + c_m u_m)$$

其中

$$2\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_m & y_m \end{vmatrix} = x_i(y_j - y_m) + x_j(y_m - y_i) + x_m(y_i - y_j)$$

$$\begin{cases} a_i = x_j y_m - x_m y_j \\ a_j = x_m y_i - x_i y_m \\ a_m = x_i y_j - x_j y_i \end{cases}$$

$$\begin{cases} b_i = y_j - y_m \\ b_j = y_m - y_i \\ b_m = y_i - y_j \end{cases}$$

$$\begin{cases} c_i = x_m - x_j \\ c_j = x_i - x_m \\ c_m = x_j - x_i \end{cases}$$

把 α_1,α_2 和 α_3 的表达式代入(4)式,得

$$u^e(x,y)=\frac{a_i+b_ix+c_iy}{2\Delta}u_i+\frac{a_j+b_jx+c_jy}{2\Delta}u_j+\frac{a_m+b_mx+c_my}{2\Delta}u_m \quad (6)$$

令

$$N_i^e=\frac{a_i+b_ix+c_iy}{2\Delta}$$

$$N_j^e=\frac{a_j+b_jx+c_jy}{2\Delta}$$

$$N_m^e=\frac{a_m+b_mx+c_my}{2\Delta}$$

则

$$u^e(x,y)=[N_i^e,N_j^e,N_m^e]\begin{bmatrix}u_i\\u_j\\u_m\end{bmatrix} \quad (7)$$

上式中 N_i^e, N_j^e, N_m^e 基为 e 单元上的基函数。按上述同样的过程,可将 k 个单元的基函数都求出来。从 u^e 的表达式中很容易证明在 $i(x_i, y_i)$ 点

$$u^e(x_i,y_i)=u_i$$

即在 i 点 $N_i^e=1$,因此 k 个单元中又公共节点的相邻单元基函数可以拼装不会产生自相矛盾。

⑤单元分析,在有限单元法的实际解题过程中,从求基函数到求极值方法都是按单元进行的,将(7)式代入(10)式中的泛函 $J^e[u]$得:

$$J^e[u^e]=J^e[u_i,u_j,u_m] \quad (8)$$

然后在 e 单元上将上式分别对 u_i, u_j, u_m 求导:

$$\begin{bmatrix}\frac{\partial J^e}{\partial u_i}\\ \frac{\partial J^e}{\partial u_j}\\ \frac{\partial J^e}{\partial u_m}\end{bmatrix}=[k_{ij}]^e\begin{bmatrix}u_i\\u_j\\u_m\end{bmatrix} \quad (9)$$

这里$[k_{ij}]^e$为单元导数式的系数矩阵,在三角形单元下,它是一个 3×3 阶方阵。

下面我们以第一类边界条件的拉普拉斯方程为例导出一个单元导数式。

$$\begin{cases}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0 & \text{在 }\Gamma\text{ 内的 }\Omega\text{ 上}\\ u=u_0 & \text{在边界 }\Gamma\text{ 上}\end{cases}$$

则在 Ω 上相应的泛函为

$$J[u]=\frac{1}{2}\int_\Omega\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2\right]d\Omega=\frac{1}{2}\sum_{e=1}^{k}\int_{\Delta_e}\left[\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2\right]d\Delta_e$$

这里 Δ_e 为第 e 个三角元。将(14)式代入上式中第 e 个单元上积分得

$$J^e=\frac{1}{2}\int_{\Delta_e}\left\{\left[\frac{\partial}{\partial x}(u_iN_i^e+u_jN_j^eu_mN_m^e)\right]^2+\left[\frac{\partial}{\partial y}(u_iN_i^e+u_jN_j^eu_mN_m^e)\right]^2\right\}d\Delta_e$$

现在求出单元导数(16)式

$$\frac{\partial J^e}{\partial u_i}=\frac{1}{4\Delta}[b_i^2+c_i^2\,b_ib_j+c_ic_jb_ib_m+c_ic_m]\begin{bmatrix}u_i\\u_j\\u_m\end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial J^e}{\partial u_j}=\frac{1}{4\Delta}[b_jb_i+c_jc_ib_j^2+c_j^2\,b_jb_m+c_jc_m]\begin{bmatrix}u_i\\u_j\\u_m\end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial J^e}{\partial u_m}=\frac{1}{4\Delta}[b_mb_i+c_mc_ib_mb_j+c_mc_jb_m^2+c_m^2]\begin{bmatrix}u_i\\u_j\\u_m\end{bmatrix}$$

即

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial J^e}{\partial u_i} \\ \frac{\partial J^e}{\partial u_j} \\ \frac{\partial J^e}{\partial u_m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_i^2 + c_i^2 & b_i b_j + c_i c_j & b_i b_m + c_i c_m \\ b_j b_i + c_j c_i & b_j^2 + c_j^2 & b_j b_m + c_j c_m \\ b_m b_i + c_m c_i & b_m b_j + c_m c_j & b_m^2 + c_m^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_i \\ u_j \\ u_m \end{bmatrix}$$

⑥集合方程组:(10)式 e 从 1 到 k,因此有 k 个如(10)式的单元导数式,把它们按公共点叠加到一起,就可得到总体极值方程组。如果将所有节点按 $1,2,\cdots,n$ 加以排列,也就是说让单元节点与数组(i,j,m)遍历 $1,2,\cdots,n$ 全体节点,则有

$$J = \sum_{e=1}^{k} J^e$$

$$\begin{cases} \frac{\partial J}{\partial u_1} = \sum_{e=1}^{k} \frac{\partial J^e}{\partial u_1} = 0 \\ \frac{\partial J}{\partial u_2} = \sum_{e=1}^{k} \frac{\partial J^e}{\partial u_2} = 0 \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\ \frac{\partial J}{\partial u_n} = \sum_{e=1}^{k} \frac{\partial J^e}{\partial u_n} = 0 \end{cases} \tag{11}$$

⑦强加边界条件的处理:对于第二类自然边界条件,可以自动进入泛函,不需要作为边界条件列出;对于第一类强加边界条件,可以直接进入方程组(11),使(11)降维。在边界上,有多少个边界节点已知值,就可降多少维。

⑧求解方程组,利用线性代数计算方法,求解经过边界条件处理后的方程组,求得的

$$u_1, u_2, \cdots\cdots, u_n$$

即为待求函数 $u(x,y)$在全域 n 个节点上的近似数值解。

七、计算凝聚态物理
Computational Condensed Physics

凝聚态是由大量粒子(分子,原子或离子等)组成,它们之间有相互作用。虽然每两个离子间的相互作用基本上是已知,但是要解决多粒子体系,一般的理论物理方法是无能为力,因此必须借助计算物理的某些方法。下面我们介绍一些最常用的也是最有效的方法。

蒙特卡罗法 Monte Carlo method 在统计物理中 N 个粒子的热力学平均值 $A(\underset{\to}{x})$是

$$\langle A \rangle = \frac{\int_\Omega \mathrm{d}\underset{\to}{x}\, A(\underset{\to}{x}) \exp[-H_N(\underset{\to}{x})/kT]}{\int_\Omega \mathrm{d}\underset{\to}{x} \exp(-H_N(\underset{\to}{x})/kT]}。$$

这里 $\underset{\to}{x}$是 N 个粒子的坐标系,Ω 是其相空间,所谓蒙特卡罗方法就是计算这相空间的积分,就是在相空间 Ω 中随机取$\{x_\upsilon\}$,$\upsilon=1,2,...,n$,但这种方法并不实用,因为在随机打点中,点子落在相积分内的概率太小而对积分的贡献不大。重要性取样法就是要解决这一问题。

重要性取样法 importance sampling 在上述的相空间积分的取样中,如果我们按某一种概率分布 $p(\underset{\to}{x}_o)$来取样 M 次,则其平均值为

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{\upsilon=1}^{M} A(\underset{\to}{x}_\upsilon) p^{-1}(\underset{\to}{x}_\upsilon) \exp[-H_N(\underset{\to}{x}_\upsilon)/kT]}{\sum_{\upsilon=1}^{M} p^{-1}(\underset{\to}{x}_\upsilon) \exp[-H_N(\underset{\to}{x}_\upsilon)/kT]},$$

最简单的概率分布就是取其平恒态的概率分布,即

$$p(\underset{\to}{x}_\upsilon) = p_{eq}(\underset{\to}{x}_\upsilon) = \exp[-H_N(\underset{\to}{x}_\upsilon)/kT]$$

则上面求和公式为

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{\upsilon=1}^{M} A(\underset{\to}{x}_\upsilon)。$$

因为 $p_{eq}(\underset{\to}{x}_\upsilon)$一般是不能直接算出的,但是可以作一马尔可夫链做出一系列$\{\underset{\to}{x}_\upsilon\}$使 $p(\{\underset{\to}{x}_\upsilon\})$当 $M\to\infty$时趋向于 $p_{eq}(\underset{\to}{x}_\upsilon)$,这种马尔可夫链定义了一跃迁概率 $W(\underset{\to}{x}_\upsilon \to \underset{\to}{x}_{\upsilon'})$,使 $p(\{\underset{\to}{x}_\upsilon\})$收敛于 $p_{eq}(\underset{\to}{x}_\upsilon)$,其充分条件(但不是必要条件)只要使其满足细致平衡条件

$$p_{eq}(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon})W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})$$
$$=p_{eq}(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon})$$

这意味着其跃迁概率之比只与能量的改变 $\Delta H=H_N(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})-H_N(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon})$有关,即

$$\frac{W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})}{W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon})}=\exp[\Delta H/kT]。$$

上式的解不是惟一的,W 的一种选择为

$$W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})$$
$$=\frac{\exp[-\Delta H/kT]}{1+\exp[-\Delta H/kT]}。$$

或者,

$$W(\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon}\rightarrow\underset{\rightarrow}{x}_{\upsilon'})$$
$$=\begin{cases}\exp[-\Delta H/kT]; & \Delta H>0\\ 1 & \Delta H\leqslant 0\end{cases}$$

分子动力法 molecular dynamic　以经典的分子运动论为例,设分子间的相互作用势能为

$$V=\begin{cases}\infty & r<\sigma_1\\ V_0 & \sigma_1<r<\sigma_2\\ 0 & r>\sigma_2\end{cases}$$

这里 r 为两个分子间距,σ_1 和 σ_2 为分子间的作用力矩。如果我们有 N 个分子,每个分子以 $\boldsymbol{u}_i$ 的速度运动,在分子间的距离均大于 σ_2 时,每个分子均作匀速直线运动,

$$\boldsymbol{r}_i(t)=\boldsymbol{r}_{i_0}+\boldsymbol{u}_i t,$$

只有当某两分子距离等于 σ_2 时碰撞就产生,设第 i 个和第 j 个分子发生碰撞,则

$$(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)^2$$
$$=(\boldsymbol{r}_{i_0}-\boldsymbol{r}_{j_0})^2+2t(\boldsymbol{r}_{i_0}-\boldsymbol{r}_{j_0})$$
$$\cdot(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_j)+t^2(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_j)^2=\sigma_2^2。$$

设

$$\boldsymbol{r}_{ij}=\boldsymbol{r}_{i_0}-\boldsymbol{r}_{j_0},$$
$$\boldsymbol{u}_{ij}=\boldsymbol{u}_{i_0}-\boldsymbol{u}_{j_0}$$

和

$$b_{ij}=(\boldsymbol{r}_{i_0}-\boldsymbol{r}_{j_0})(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_j),$$
$$C_{ij}^{(a)}=r_{ij}^2-\sigma_\alpha^2,$$

则第 i 个与第 j 个分子从开始运动到发生碰撞的时间 t 为下面方程的解:

$$t^2u_{ij}^2+2tb_{i,j}+r_{ij}^2-\sigma_\alpha^2=0$$

如果

$$\beta_{ij}^2=b_{ij}^2-u_{ij}^2\sigma_\alpha^2<0,$$

则此两粒子不会发生碰撞,如

$$b_{ij}<0$$

则两粒子中心在接近,计算第一对发生碰撞的粒子和时间 t,在 i 和 j 粒子碰撞后,第 i 和 j 粒子的速度的大小和方向均发生改变,把新的速度代入第 i 和 j 个粒子并设 $t=0$,再进行下一轮模拟,经过多次模拟就可达到热平恒态,从这时开始,用同样方法可模拟各种物理量。

迁移过程法 transport method　用蒙特卡罗法模拟迁移过程是用直接模拟法,就是考虑单个粒子,模拟它在物质中的随机运动的历史,并记录其在运动过程中对感兴趣的物理量的贡献,对单粒子运动历史进行大量的重复模拟之后,就可以对物理模拟量进行统计平均,可得到所需要的物理结果。这实际上是作了假定:大量粒子的统计结果与单粒子在相同条件下的大量重复模拟的统计结果是相同的。

八、量子多体问题
Quantum Many-body Problems

量子力学成功地解决了单体和两体问题,但是具体问题往往涉及大量粒子,用量子统计方法往往要作很多近似,在很多情况下甚至无能为力,量子蒙特卡罗方法利用量子模拟方法(量子蒙特卡罗方法)提供了研究量子多体问题的一种有力的,有时甚至是惟一的方法。量子蒙特卡罗方法有许多形式,我们介绍几种常用的方法。

自洽场方法 self-consistent field method　自洽场方法在量子多体问题中经常用到的一种近似方法,我们用原子中 N 个电子系统为例,设其波函数为

$$\Psi=\Psi(x_1,x_2,\ldots,x_N)。$$

$x_1,x_2,\ldots,x_N$ 为原子内各粒子的坐标,它的薛定谔方程为

$$H\Psi=E\Psi.$$

这里哈密顿算符为

$$H=\sum_{\mu=1}^{N}H_{\mu}+\frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{N}\sum_{v=1}^{N}\frac{e^{2}}{|x_{\mu}-x_{v}|}.$$

第 μ 个电子在其所在的原子核势能 V_{nucl} 作用下的哈密顿 H_{μ} 为

$$H_{\mu}=-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla_{\mu}^{2}+V_{\mathrm{nucl}}(x_{\mu}),$$

其中 m 为电子的质量，V_{nucl} 为

$$V_{\mathrm{nucl}}(x_{\mu})=-\frac{Ne^{2}}{|x_{\mu}|}.$$

我们这里把坐标原点放在原子核的中心。我们将其波函数用各电子的波函数的乘积来近似，即

$$\Psi=u_{1}(x_{1})u_{2}(x_{2})\cdots u_{N}(x_{N})$$

因之有

$$H\Psi=\sum_{\mu=1}^{N}(u_{1}\cdots u_{\mu-1}u_{\mu+1}\ldots u_{N})H_{\mu}u_{\mu}+\frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{N}\sum_{\substack{v=1\\ \mu\neq v}}^{N}(u_{1}\ldots)\frac{e^{2}}{x_{\mu v}}u_{\mu}u_{v},$$

$$x_{\mu v}=|x_{\mu}-x_{v}|.$$

这样一来我们可以分离成 N 个方程：

$$\left(H_{\mu}+\sum_{\substack{v=1\\ v\neq\mu}}^{N}\int u_{v}^{*}\frac{e^{2}}{x_{\mu v}}u_{v}\mathrm{d}x_{v}\right)u_{\mu}=\varepsilon_{\mu}u_{\mu}.$$

这里电子—电子间的势能为

$$V_{v\mu}=e^{2}\int\frac{u_{v}^{*}u_{v}}{|x_{\mu}-x_{v}|}\mathrm{d}x_{v},$$

它是 x_{μ} 的函数，引入静电势 Φ_{v}：

$$\Phi_{v}(x_{\mu})=e\int\frac{u_{v}^{*}u_{0}}{|x_{\mu}-x_{v}|}\mathrm{d}x_{v},$$

这就是电荷密度 $\rho_{v}=eu_{v}^{*}u_{v}$ 的泊松方程的解，

$$\nabla^{2}\Phi\backslash=-4\pi eu_{v}^{*}u_{v}.$$

这里 Φ_{v} 我们称之为自洽势，因此其哈特里方程可写为

$$\left\{-\frac{\hbar^{2}}{2m}\nabla_{\mu}^{2}+V_{\mathrm{nucl}}(x_{\mu})+\sum_{\substack{v=1\\ v\neq\mu}}^{N}e\phi_{v}(x_{\mu})\right\}u_{\mu}=\varepsilon_{\mu}u_{\mu}。$$

从这里我们可解出 u_{μ}，因此可求得整个系统的波函数 Ψ。

变分蒙特卡罗法 variational Monte Carlo method 变分蒙特卡罗方法是介于经典与量子蒙特卡罗法之间，它能有效的解出基态，但是不能处理非基态的问题。

任意波函数 $|\psi\rangle$ 均可按任一组完备的波函数基底展开，但是一般说来，它的展开式有无穷项。而进行数值计算只能取有限项，变分蒙特卡罗就是要选择一组恰当的尝试波函数 $|\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}\rangle$，这里 $\{\eta\}$ 一般说来是一组变分参数，在选定了恰当的基底 $|\phi_{\mathrm{n}}\rangle$ 后

$$|\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}\rangle=\Sigma_{n}C_{n}\{\eta\}|\phi_{n}\rangle,$$

这里展开系数 $C_{n}\{\eta\}$ 是一组已知的 η 函数，任意算符 O 的期望值为

$$\langle O\rangle=\langle\psi^{\mathrm{T}}|O|\psi^{\mathrm{T}}\rangle/\langle\psi^{\mathrm{T}}|\psi^{\mathrm{T}}\rangle$$

系统能量 E 为哈密顿算符 H 的期望值，

$$E\{\eta\}=\langle H\rangle=\langle\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}|H|\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}\rangle/\langle\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}|\psi^{\mathrm{T}}\{\eta\}\rangle$$

显然与 $\{\eta\}$ 有关，$E\{\eta\}$ 对 η 求极小值

$$\mathrm{d}E\{\eta\}/\mathrm{d}\eta=0$$

求得 η 的值，因此也就得到系统的波函数 $|\psi\{\eta\}\rangle$。

互作用玻色子的量子蒙特卡罗法 Monte Carlo Simulations for interacting bosons 互作用玻色子的哈密顿算符 H 为

$$H=\frac{1}{2}\sum p_{i}^{2}+V(x_{1},x_{2},\ldots,x_{N})\overset{\mathrm{def}}{=\!=}K+V,$$

这里 p_{i} 是第 i 粒子的动量算符，x_{i} 为它的坐标算符，$V(x_{1},x_{2},\ldots,x_{n})$ 是玻色子间的互作用势和与玻色子外场互作用势。

利用 Suzuki-Trotter 关系式，配分函数 Z 可写为

$$Z=\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\beta H})=\mathrm{Tr}(\mathrm{e}^{-\Delta\tau K}\mathrm{e}^{-\Delta\tau V}\ldots\mathrm{e}^{-\Delta\tau K}\mathrm{e}^{-\Delta\tau V})+O[1/m]^{2}\overset{\mathrm{def}}{=\!=}Z_{m}+O[1/m]^{2}$$

这里 $\Delta\tau=\beta/m$。在每一很小的传波子中，插入一组完备态，因之配分函数为

$$Z_{m}=\sum_{\phi_{1}\ldots\phi_{2m}}\langle\phi_{2i-1}|\mathrm{e}^{-\Delta\tau K}|\phi_{2i}\rangle\langle\phi_{2i}|\mathrm{e}^{-\Delta\tau V}|\phi_{2i+1}\rangle$$

这里注意 $\varphi_{2m+1}=\phi_{1}$，如果 i 是奇数，我们选

择$|\phi_i\rangle$是动量算符的本征态；如果 i 是偶数，我们选择$|\phi_i\rangle$是坐标算符的本征态。对动量态的求和可以给出，因之我们得到 Suzuki-Trotter 路程积分

$$Z_m=\int\prod_{i=1}^{N}\prod_{l=1}^{m}\frac{dx_i^{(l)}}{\sqrt{\Delta\tau/2\pi}}\exp\left[-\Delta\tau\sum_l|(x_i^{(l+1)}-x_i^{(l)})/\Delta\tau|^2+V(x_1^l,...,x_N^l)\right]。$$

格林函数蒙特卡罗法 Green's function Monte Carlo method 格林函数蒙特卡罗法就是级数法。从系统的一个几乎任意态出发，重复使用哈密顿算符 H，可以把基态过滤出来。计算过程是一迭代过程：

$$|\phi^{n+1}\rangle=[1-\tau(H-\omega)]|\phi^n\rangle=G|\phi^n\rangle$$

这里格林函数 G 可看作是虚时演化算符 $\exp(1-(\tau(H-\omega))$的级数展开。如果虚时满足如下条件

$$\tau<2(E_{\max}-\omega)$$

则$|\phi^n\rangle$趋向于基态。格林函数蒙特卡罗法是对矩阵求逆进行，例如对硬球玻色子，

$$H=-J\sum_{\langle ij\rangle}b_i^+b_j+J\sum_{\langle ij\rangle}n_in_j+E_0$$

它的基态为

$$|R\rangle=\prod_{l=1}^{N_b}b_{r_l}^+|0\rangle,$$

在这基底下，迭代式为

$$\phi^{n+1}|R\rangle=\sum_{R'}G(R,R')\phi^n(R')$$

这里格林函数 $G(R,R')$将 R'态传播到 R

$$G(R,R')=\langle R|[1-\tau(H-\omega)]|R'\rangle$$

这里格林函数在这基底下极为简单

$$G(R,R')=\begin{cases}1-\tau(U(R)-\omega), & R=R';\\ \tau J/2, & R\subset N(R');\\ 0, & \text{其他。}\end{cases}$$

这里

$$U(R)=\langle R|H_{pot}|R\rangle$$

是势能的期望值。

世界线蒙特卡罗法 world line Monte Carlo method 在量子统计中，算符 O 的期望值为

$$\langle O\rangle=Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H}O\},\quad Z=\mathrm{Tr}\{e^{-\beta H}\}$$

在占据数表象下

$$|\Gamma\rangle=|R\rangle=|R^{\uparrow}\rangle|R^{\downarrow}\rangle=\prod_{i=1}^{N}(a_{i\uparrow}^+)^{R_i^{\uparrow}}\prod_{i=1}^{N}(a_{i\downarrow}^+)^{R_i^{\downarrow}}|0\rangle$$

为了简单起见，我们以一维格点为例并略去自旋，对于任何一维格点的哈密顿算符 H 的动能部分 K 分为偶数和奇数格点上的最近邻跃迁，

$$K=K_{even}+K_{odd}=\sum_{ieven}(a_i^+a_{i+1}+h.c.)+\sum_{iodd}(a_i^+a_{i+1}+h.c.)$$

对 $H_{\mathrm{even/odd}}=K_{\mathrm{even/odd}}+V/2$，我们将这里我们用 Suzuki-Trotter 公式将演化过程分成一系列无限小间隔并在每一间隔中插入 $1=\sum_i|R_i\rangle\langle R_i|$，得

$$Z_m=\sum_{R_1\ldots R_{2m}}\langle R_1|\exp(-\Delta\tau H_{even})|R_2\rangle\langle R_2|\exp(-\Delta\tau H_{odd})|R_3\rangle\ldots\langle R_{2m-1}|\exp(-\Delta\tau H_{even})|R_{2m}\rangle\langle R_{2m}|\exp(-\Delta\tau H_{odd})|R_1\rangle$$

这里 $\Delta\tau=\beta/m$，也就是说我们把演化过程分成 m 个小间隔。再利用 Suzuki-Trotter 公式，将哈密顿算符 H 中的动能 K 与势能 V 分解，得

$$Z_m=\sum_{R_1\ldots R_{2m}}\left\{\prod_{\alpha=1}^{m}\langle R_{2\alpha-1}|\exp(-\Delta\tau K_{even})|R_{2\alpha}\rangle\langle R_{2\alpha}|\exp(-\Delta\tau K_{odd})|R_{2\alpha+1}\rangle\right\}\times\exp\left(-\frac{\Delta\tau}{2}\sum_{\alpha=1}^{2m}E^V(R_\alpha)\right)$$

这里 $R_{2m+1}=R_1$，在这种分解之下各个 $K_{even/odd}$是相互可对易，而且每一$\langle R_\alpha|e^{-\Delta\tau K}|R_{\alpha+1}\rangle$分解为相互独立的二维矩阵的乘积。

矩阵的数值严格对角化方法 numerical exact diagonalization of matrix 这种方法是对强关联电子系统的大型哈密顿矩阵，进行数值严格

对角化，以求得系统的能量本征值和本征波函数。它又称为 Lanczos 方法。

在对一个实际的物理系统进行理论研究的过程中，经常会遇到要求一个大型或超大型埃尔米特(Hermit)矩阵的本征值和本征函数的问题。矩阵的维数往往会达到几十万甚至上百万。这样的矩阵在包含有大量微观自由度的宏观体系中是经常遇到的。Lanczos 方法就是根据上述特点所发展起来的一种极为有效的哈密顿矩阵求解本征值和本征函数的数值方法。近年来，它已被广泛应用到强关联系统、无序系统等极为重要的物理系统之中，成为计算物理中一项至关重要的新方法。矩阵维数的增大使得求解本征值和本征函数变得非常困难，但是，我们看到，在绝大多数在物理上感到兴趣的问题中，哈密顿矩阵都有如下特点：

(1)哈密顿矩阵都是埃尔米特矩阵。

(2)尽管哈密顿矩阵异常庞大，但是其中绝大多数非对角矩阵元都是零，只有数量很少的非零矩阵元，也就是说，这种矩阵是极为稀疏的矩阵。

(3)所考虑的物理系统，一般都具有一定的对称性，满足一定的守恒律。这样，我们就可以根据对称性和守恒律的要求，采用一定的基函数，使哈密顿矩阵分解成为互不关联的子矩阵，从而可以对比较小的子矩阵分别求解。

我们设 H 是某一在 N 维 Hilbert 空间中的埃尔米特算符，而 ν_1 是该空间中的一个任意的归一化的向量，即：$\boldsymbol{v}_1^{+}\boldsymbol{v}_1=1$。我们连续地用 H 去作用，来构造出一组正交归一的向量：

$$H\boldsymbol{v}_1 = \alpha_1\boldsymbol{v}_1 + \beta_1\boldsymbol{v}_2$$

$$H\boldsymbol{v}_2 = \beta_1\boldsymbol{v}_1 + \alpha_2\boldsymbol{v}_2 + \beta_2\boldsymbol{v}_3$$

$$H\boldsymbol{v}_3 = \beta_2\boldsymbol{v}_2 + \alpha_3\boldsymbol{v}_3 + \beta_3\boldsymbol{v}_4$$

我们注意到这些方程的结构是三对角型的，即每个方程的右边只出现本身和左右相邻的两个元素。这是由哈密顿矩阵的埃尔米特性所决定的。这一迭代序列将在正交归一向量走遍整个 Hilbert 空间后自动中止，也就是说，在做到第 N 步时，我们有：

$$H\boldsymbol{v}_N = \beta_{N-1}\boldsymbol{v}_{N-1} + \alpha_N\boldsymbol{v}_N + \beta_N\boldsymbol{v}_{N+1}$$

但由于在 Hilbert 空间中最多只能有 N 个相互正交归一的向量，因此新的向量 $\boldsymbol{v}_{N+1}$必须为零。这样，这一方法具有一种十分有用的性质，即：即使我们一开始并不知道向量空间的维数，这一方法也会很好地自动中止。注意到我们这里处理的是一般的算符，而不是矩阵，因此空间的维数不需要明显地写出来。通过这个三对角矩阵，系统的最低能量本征值和本征波函数就可以方便地求解。

附录一　诺贝尔物理奖简表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
2004	戴维•格罗斯 David J. Gross	美	1941～	粒子物理强相互作用理论中的“渐近自由”现象的发现	1/3
	戴维•波利策 H. David Politzer	美	1949～		1/3
	弗兰克•维尔切克 Frank Wilczer	美	1951～		1/3
2003	阿列克谢•阿布里科索夫 Alexei A. Abrikosov	美,俄	1928～	超导和超流理论方面的先驱性贡献	1/3
	维塔利•金茨堡 Vitaly L.Ginzburg	俄	1916～		1/3
	安东尼•莱格特 Anthony J.Leggett	英,美	1938～		1/3
2002	雷蒙德•戴维斯 Raymond Davis Jr.	美	1914～	天体物理中宇宙中微子的检测方面的贡献	1/4
	小柴昌俊 Masatoshi Koshiba	日本	1926～		1/4
	里卡尔多•贾柯尼 Riccardo Giacconi	美	1931～	天体物理中宇宙 X 射线源的发现	1/2
2001	卡尔•维曼 Carl E.Wieman	美	1951～	发现新物质状态 BEC(碱金属原子稀薄气体的玻色-爱因斯坦凝聚)	
	沃尔夫冈•克特勒 Wolfgang Ketterle	德	1957～		
	埃里克•康奈尔 Eric A. Cornell	美	1961～		
2000	杰克•基尔比 Jack S. Kilby	美	1923～	发明和开发集成电路芯片	1/2
	泽雷斯•阿尔费罗夫 Zhores I. Alferov	白俄罗斯	1930～	发明了基于异质结构快速光电子和微电子元件	1/4
	赫伯特•克勒默 Herbert Kroemer	美	1928(德)～		1/4
1999	杰拉尔杜斯•霍弗特 Gerardus 't Hooft	荷	1946～	解释了物理学领域中电磁相互作用和弱相互作用的量子结构以及揭示了粒子物理学理论如何用来精确计算物理量,提供了可以用于预计新的粒子特性的“理论机器”	
	马丁努斯•韦尔特曼 Martinus J. G. Veltman	荷	1931～		

续表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1998	罗伯特·劳克林 Robert B. Laughlin	美	1960～	论证了新形式的量子流体存在，它是由分数电子电荷的新型“准粒子”组成，解释了分数量子霍尔效应	
	霍斯特·施特默 Horst L. Störmer	德	1949～	在发现分数量子霍尔效应方面作出的杰出贡献	
	崔琦 Daniel C. Tsui	美	1939～		
1997	朱棣文 Steven Chu	美	1948～	激光致冷和捕获原子方法	
	克洛德·科恩 Claude Cohen-Tannoudji	法	1933～		
	威廉·菲利普斯 William D. Phillips	美	1948～		
1996	戴维·李 David M. Lee	美	1931～	发现了氦－3超流性	
	道格拉斯·奥谢罗夫 Douglas D. Osheroff	美	1945～		
	罗伯特·理查森 Robert C. Richardson	美	1937～		
1995	马丁·佩尔 Martin L. Perl	美	1927～	轻粒子物理学中开创性的实验贡献，特别是发现了 τ 轻子	
	弗雷德里克·赖因斯 Frederick Reines	美	1918～	检测到中微子	
1994	布罗克豪斯 Bertram N. Brockhouse	加	1918～	研究凝聚态物质的中子散射技术的开创性研究工作，特别是对中子谱学的发展作出的贡献	
	沙尔 Clifford G. Shull	美	1915～	对中子衍射技术的研究工作	
1993	拉塞尔·艾伦·赫尔斯 Russell A. Hulse	美	1950～	发现了新类型脉冲星，由此打开了研究引力新的可能性	
	小约瑟夫·胡顿·泰勒 Joseph H. Taylor Jr.	美	1941～		

续表

年度	姓名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1992	乔治·夏帕克 Georges Charpak	法	1924～	发明并研制出粒子探测器，开创了高能物理研究工作的新纪元，在核物理学、宇宙物理学、生物学、医学等领域都有广泛的应用	
1991	皮埃尔·吉勒·德燃纳 Pierre-Gilles De Gennes	法	1932～	把研究简单系统中有序现象的方法，推广到复杂物质系统，特别是液晶和高分子聚合物	
1990	弗里德曼 Jerome L. Friedman	美	1930～	电子对质子的深度非弹性散射的开创性研究	
	肯得尔 Henry W. Kendall	美	1926～1999		
	泰勒 Richard E. Taylor	加	1929～		
1989	拉姆齐 Norman F. Ramsey	美	1915～	发明分离振荡场的方法并应用于重氢激射器和原子钟	1/2
	德默尔特 Hans G. Dehmelt	美	1922～	发展了离子捕获技术，用于高精度测量基本物理常数	1/2
	保罗 Wolfgang Paul	德	1913～		
1988	莱德曼 Leon M. Lederman	美	1922～	发现 μ 子型中微子，证明轻子的二重结构	
	施瓦茨 Melvin Schwartz	美	1932～		
	施坦伯格 Jack Steinberger	美	1921～		
1987	贝德罗兹 J.Georg Bednorz	德	1950～	陶瓷材料中超导性的重要科学发现	
	米勒 K. Alex Müller	瑞士	1927～		
1986	鲁斯卡 Ernst Ruska	德	1906～1988	电子光学基础工作和第一台电子显微镜设计	1/2
	宾尼格 Gerd Binnig	德	1947～	扫描隧道显微镜的设计	1/2
	罗赫尔 Heinrich Rohrer	瑞士	1933～		

续表

年度	姓　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1985	克里青 Klaus Von Klitzing	德	1943～	量子霍尔效应的发现	
1984	鲁比亚 Carlo Rubbia	意	1934～	发现 $W\pm$ 粒子和 Z^0 粒子以及为发现这些粒子而建造的大型设备中所作出的巨大贡献	
	范德梅尔 Simon van der Meer	荷	1925～		
1983	钱德拉赛卡 Subramanyan Chandrasekhar	美	1910～	对恒星结构和演化过程的研究,特别是对白矮星的结构和变化的精确预言	1/2
	福勒 William A. Fowler	美	1911～1995	核反应的理论和实验的研究	1/2
1982	肯尼思·威尔逊 Kenneth G. Wilson	美	1936～	建立相变的临界现象理论	
1981	布洛姆伯根 Nicolaas Bloembergen	美	1920～	非线性光学及激光光谱学的研究	1/2
	肖洛 Arthur L. Schawlow	美	1921～		
	凯·赛格巴恩 Kai M. Siegbahn	瑞典	1918～	高分辨率测量仪器的发展,以及光电子和轻元素定量分析方面的工作	1/2
1980	克罗宁 James Cronin	美	1931～	在中性 K 介子蜕变中发现复合宇称 CP 的不守衡	
	菲奇 Val Fitch	美	1923～		
1979	温伯格 Steven Weinberg	美	1932～	基本粒子之间弱作用和电磁作用的统一的理论的贡献	
	萨拉姆 Abdus Salam	巴基斯坦	1926～		
	格拉肖 Sheldon Glashow	美	1933～	发展了温伯格-萨拉姆理论	
1978	卡皮查 Pyotr Kapitsa	原苏联	1894～1984	在低温物理学领域中基本的发明和发现	1/2
	彭齐亚斯 Arno Penzias	美	1933～	宇宙微波背景辐射的发现	1/2
	罗伯特·威尔逊 Robert Woodrow Wilson	美	1936～		

续表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1977	菲利浦•安德孙 Philip W. Anderson	美	1923～	对磁性和无序系统的电子结构的基础研究	
	莫特 Sir Nevill F. Mott	英	1905～		
	范弗莱克 John H. van Vleck	美	1899～1980		
1976	里克特 Burton Richter	美	1931～	彼此独立地发现一种称为 Ψ/J 的新粒子	
	丁肇中 Samuel C.C. Ting	美	1936～		
1975	阿格•玻尔 Aage N. Bohr	丹表	1922～	发现原子核中的集体运动和粒子运动之间的联系以及在这基础上发展的核结构理论	
	莫特尔孙 Ben R. Mottelson	丹麦	1926～		
	雷恩瓦特 James Rainwater	美	1917～1986		
1974	赖尔 Martin Ryle	英	1918～1984	在射电天体物理学中的开创性研究，特别是综合孔径技术的发明	
	赫尔斯 Antony Hewish	英	1924～	在射电天文物理学中开拓性研究以及在发现脉冲星中的决定性作用	
1973	江崎 Leo Esaki	日本	1925～	在实验中发现了半导体和超导体中的隧道现象	1/2
	贾埃弗 Ivar Giaever	美	1929～		
	约瑟夫森 Brian D. Josephson	英	1940～	理论上预言约瑟夫森效应的性质	1/2
1972	巴丁 John Bardeen	美	1908～1991	提出了称为 BCS 理论的超导理论	
	库珀 Leon N. Cooper	美	1930～		
	施里弗 Robert Schrieffer	美	1931～		
1971	加伯 Dennis Gabor	英	1900～1979	发明和发展全息照相	

续表

年度	姓 名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1970	阿尔芬 Hannes Alfvén	瑞典	1908～	在磁流体动力学方面的基础研究工作和发现及其在等离子物理中的应用	1/2
	尼尔 Louis Néel	法	1904～	对固体物理学有重要应用的铁磁和反铁磁方面的发现和基本研究	1/2
1969	盖尔曼 Murray Gell-Mann	美	1929～	关于基本粒子提出的分类及其相互作用的发现	
1968	阿尔瓦雷兹 Luis Alvarez	美	1911～1988	发展了氢气泡室和数据分析技术而发现了一大批共振态,从而对基本粒子物理作出了决定性的贡献	
1967	贝斯 Hans Bethe	美	1906～	对核反应理论的贡献特别是关于恒星中能量产生的发现	
1966	卡斯特勒 Alfred Kastler	法	1902～1984	发现和发展了研究原子中赫兹共振的光学方法	
1965	朝永振一郎 Sin-Itiro Tomonaga	日本	1906～1979	在量子电动力学方面所做对基本粒子物理学具有深刻影响的基础工作	
	薛温格 Julian Schwinger	美	1918～1994		
	费曼 Richard P. Feynman	美	1918～1988		
1964	汤斯 Charles H. Townes	美	1915～	量子电子学方面的基本工作导致基于脉泽-激光原理的振荡器和放大器的建成	1/2
	巴索夫 Nicolay G. Basov	原苏联	1922～	实验物理领域中的基本研究,他们的工作导致脉冲和激光器的建成	1/2
	普罗霍罗夫 Alexander M. Prokhorov	原苏联	1916～		
1963	维格纳 Eugene Wigner	美	1902～1995	原子核和基本粒子理论以及对称性基本原理的发展和应用	1/2
	梅耶夫人 Maria Geoppert-Mayer	美	1906～1972	发现核的壳层结构	1/2
	詹森 J. Hans D. Jensen	德	1907～1973		

续表

年度	姓　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1962	朗道 Lev Landau	原苏联	1908～1968	关于凝聚态物质特别是液氦的开创性理论	
1961	霍夫斯塔特 Robert Hofstadter	美	1905～1990	开创了电子受原子核散射方面的研究以及用磁方法所获得的有关原子核结构方面的发现	1/2
	穆斯堡尔 Rudolf Möessbauer	德	1929～	研究 γ 辐射的共振吸收以及发现穆斯堡尔效应	1/2
1960	格拉泽 Donald A. Glaser	美	1926～	发明气泡室	
1959	西格里 Emilio Segrè	美	1905～1989	发现反质子	
	张伯伦 Owen Chamberlain	美	1920～		
1958	切仑科夫 Pavel A. Cherenkov	原苏联	1904～1990	发现和解释了切仑科夫效应	
	弗兰克 M. Frank	原苏联	1908～1990		
	塔姆 Y. Tamm	原苏联	1885～1971		
1957	杨振宁 Chen Ning Yang	美	1922～	对宇称定律的深入研究，导致了有关基本粒子的重大发现	
	李政道 Tsung-Dao Lee	美	1926～		
1956	肖克利 William B. Schockley	美	1910～1989	对半导体的研究和发现晶体管效应	
	巴丁 John Bardeen	美	1902～1991		
	布拉顿 Walter H. Brattain	美	1902～1987		
1955	兰姆 Willis E. Lamb	美	1913～	氢光谱精细结构的发现	1/2
	库什 Polykarp Kusch	美	1911～1993	电子磁矩的精密测定	1/2
1954	玻恩 Max Born	英	1882～1970	量子力学方面的基本研究，特别是对波函数的统计解释	1/2
	博思 Walther Bothe	德	1891～1957	提出符合法以及由此取得的发现	1/2

续表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1953	泽尼克 Frits Zernike	荷	1891～1957	论证相衬法，特别是发明了相衬显微镜	
1952	布洛赫 Felix Bloch	美	1905～1983	发展了核磁精密测量的新方法以及一些有关的发现	
	珀赛尔 E. M. Purcell	美	1912～		
1951	科克罗夫特 John Cockcroft	英	1897～1967	用人工加速粒子进行的原子核蜕变的开创性工作	
	瓦尔顿 Ernest T.S. Walton	爱尔兰	1903～1995		
1950	鲍威尔 Cecil Powell	英	1903～1981	发展了研究核过程的照相方法以及用此法发现介子	
1949	汤川秀树 Hideki Yukawa	日本	1907～1981	在原子核力理论工作的基础上预言了介子的存在	
1948	布莱克 Patrick M.S. Blackett	英	1897～1974	改进了威尔逊云雾室方法以及由此作出的在核物理领域内和宇宙射线方面的一系列发现	
1947	阿普顿 Edward V. Appleton	英	1892～1965	对大气高层物理性质的研究，特别是发现了阿普顿层——无线电短波电离层	
1946	布里奇曼 Percy W. Bridgman	美	1882～1961	发明产生很高压力的装置及利用这一装置在高压物理领域内所作出的贡献	
1945	泡利 Wolfgang Pauli	奥	1900～1958	发现不相容原理——泡利原理	
1944	拉比 Isidor Isaac Rabi	美	1898～1988	发展并完善了分子束磁共振方法	
1943	斯特恩 Otto Stern	美	1888～1969	发现分子束方法以及以发现质子的磁矩	
1942	未颁发				
1941	未颁发				
1940	未颁发				
1939	劳伦斯 Lawrence Ernest Orlando	美	1901～1958	发明和发展了回旋加速器，以及使用加速器所取得的成果，特别是人工放射性元素的获得	

续表

年度	姓　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1938	费米 Enrico Fermi	意	1901～1954	发现用中子辐射产生的新放射性元素以及慢中子产生的核反应	
1937	戴维孙 Clinton Davisson	美	1881～1958	发现电子在晶体中的衍射现象	
	乔治·汤姆孙 George Paget Thomson	英	1892～1975		
1936	赫斯 Victor F. Hess	奥	1883～1964	发现宇宙辐射	1/2
	卡尔·安德孙 Carl D. Anderson	美	1905～1991	发现正电子	1/2
1935	查德威克 Chadwick,James	英	1891～1974	发现中子	
1934	未颁发				
1933	薛定谔 Schrödinger Erwin	奥	1887～1961	发现原子理论新的有效形式	
	狄拉克 Dirac Paul Maurice	英	1902～1984		
1932	海森伯 Heisenberg,Werner	德	1901～1976	创立量子力学,导致发现氢的同素异形体	
1931	未颁发				
1930	拉曼 Raman Chandrasekhara Venkata	印度	1888～1970	光散射方面的工作和拉曼效应的发现	
1929	德布罗意 De Broglie, Prince Louis-Victor Pierre Raymond	法	1892～1987	发现电子的波动性	
1928	里查孙 Owen Willans Richardson	英	1879～1958	热离子现象方面的工作特别是发现了以他命名的定律	
1927	康普顿 Arthur H. Compton	美	1892～1962	发现以他命名的效应——康普顿效应	1/2
	查尔斯·威尔孙 C. T. R. Wilson	英	1869～1959	发明通过蒸气凝结观察带电粒子径迹的方法	1/2
1926	佩林 Jean Baptiste Perrin	法	1870～1942	对物质结构不连续性的研究,特别是对沉淀平衡的发现	

续表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1925	弗兰克 James Franck	德	1882～1964	发现电子和原子的碰撞规律	
	赫兹 Gustav Hertz	德	1887～1975		
1924	曼尼·赛格巴恩 Manne Siegbahn	瑞典	1886～1978	X射线光谱学方面的发现和研究	
1923	密立根 Robert A. Millikan	美	1868～1953	基本电荷及光电效应方面的工作	
1922	尼尔斯·玻尔 Niels Bohr	丹麦	1885～1962	原子结构和原子辐射的研究	
1921	爱因斯坦 Albert Einstein	德	1879～1955	发现光电效应的规律和理论物理的成就	
1920	纪尧姆 Charles Edouard Guillaume	瑞士	1861～1938	发现镍钢合金的反常性以及它在精密物理中的重要性	
1919	斯塔克 Johannes Stark	德	1874～1957	发现阴极射线的多普勒效应和电场中的谱线分裂	
1918	普朗克 Max Plank	德	1858～1947	能量量子的发现，从而对物理学的发展作出巨大贡献	
1917	巴克拉 Charles Glover Barkla	英	1877～1944	发现元素的特征X辐射	
1916	未颁发				
1915	威廉·布拉格 William Bragg	英	1862～1942	用X射线研究晶体结构	父子分享
	劳伦斯·布拉格 Lawrence Bragg	英	1890～1971		
1914	劳厄 Max von Laue	德	1879～1960	发现X射线在晶体中的衍射	
1913	昂内斯 Heike Kamerlingh Onnes	荷	1853～1926	对物质低温性质的研究和液氦的制备	
1912	达列 Gustaf Dalén	瑞典	1869～1937	发明可以和燃点航标、浮标气体蓄电池联合使用的自动装置	
1911	维恩 Wilhelm Wien	德	1864～1928	发现热辐射的规律	
1910	范德瓦尔斯 Johannes Diderik van der Waals	荷	1837～1923	气体和液体状态方程方面的工作	

续表

年度	姓　　名	国籍	生卒年	获奖内容	附注
1909	马可尼 Guglielmo Marconi	意	1874～1937	发明无线电报	
	布劳恩 Ferdinand Braun	德	1850～1918	对无线电报的改进	
1908	李普曼 Gabriel Lippmann	法	1845～1921	发明基于干涉现象的彩色照相	
1907	迈克尔逊 Albert A. Michelson	美	1852～1931	因他的精密光学仪器和借助这些仪器所进行的光谱学和度量学的研究	
1906	约瑟夫•汤姆孙 J. J. Thomson	英	1856～1940	对电荷通过气体的理论和实验研究	
1905	勒纳德 Philipp Lenard	德	1862～1947	阴极射线方面的工作	
1904	瑞利 Lord Rayleigh	英	1842～1919	对一些重要的气体密度的研究，以及 Ar 的发现	
1903	贝克勒耳 Henri Becquerel	法	1852～1908	发现天然放射性	1/2
	皮埃尔•居里 Pierre Curie	法	1859～1906	在 Becquerel 所发现的放射性现象方面所做的工作	1/2
	居里夫人 Marie Curie	法	1867～1934		
1902	洛伦兹 Hendrik A. Lorentz	荷	1853～1928	研究磁场对辐射的影响	
	塞曼 Pieter Zeeman	荷	1865～1943		
1901	伦琴 Wilhelm Conrad Röntgen	德	1845～1923	发现 X 射线	

参见：The Nobel Prize in Physics-Laureates。

附录二 物理量单位与量纲

一、物理学中的单位制

(一)基本单位与导出单位

物理学是一门实验科学,常需要对各种物理量进行测量。对一个物理量测量的结果一般包括所得到的数值和所用的单位两个部分。

由于各物理量之间存在规律性的联系,故可不必对每一物理量的单位都独立予以规定,而只需选取一组互相独立的物理量为基本量,并为每一基本量规定一个基本单位。至于其他物理量,由于它们都可由基本量通过有关关系式(定义与定律)导出,因而称为导出量,与之所对应的单位称为导出单位。

(二)单位制

由基本单位及一系列有关关系式得到的导出单位就制定了一套单位,这就构成了一定的单位制。

1.国际单位制(SI)

为了国际上的贸易、工业及科学技术交往的需要,1875 年在巴黎由 17 国外长制定了米制公约。米制公约规定:长度单位为米,质量单位为千克(公斤)、时间单位为秒,这种单位制称为米·千克·秒制(英文简写为 MKS 制)。随着电磁学、热力学、光辐射学和微观物理的发展,基本量由 3 个扩大到 7 个,在此基础上发展起来的单位制称为国际单位制,这是在 1960 年第 11 届计量大会上首先予以确认的,并统一以 SI 表示。

在国际单位制中,将单位分为三类:基本单位、导出单位与辅助单位。其中基本单位共有 7 个,它们分别是:

①长度单位——米(m)。1889 年第 1 届国际计量大会上批准以铂铱米尺(称为国际米原器)的长度为 1 米。1983 年第 17 届国际计量大会上对米作了最新的定义:“米是 1/299792458 秒的时间间隔内光在真空中行程的长度”。

在通过“米”的定义的同时,还规定了复现新的米定义的如下三种方法(而在此之前应首先规定真空中的光速为 $c=299\ 792\ 458\mathrm{m\cdot s^{-1}}$):一是利用平面电磁波在真空中经过时间间隔 Δt 所传播的距离 $l=c\Delta t$ 的关系,从计量时间 Δt 得出 l;二是利用频率为 f 的平面电磁波在真空中的波长 $\lambda=c/f$ 的关系,从测量频率 f 得出波长 λ;三是可采用所规定的某种饱和吸收稳频激光的辐射,或某些光谱灯的辐射,通过测量其频率而得出波长。

②质量单位——千克(kg)。1889 年第一届国际计量大会上批准了以国际千克原器为质量单位。1901 年第 3 届国际计量大会中规定:千克是质量(而非重量)的单位,它等于国际千克原器的质量。这个由铂铱制成的国际千克原器保存在国际计量局。

③时间单位——秒(s)。最初,时间的单位“秒”被定义为地球绕太阳公转的平均太阳日的 1/86400。但地球公转速率常在变化,于是 1967 年第 13 届国际计量大会又据当时原子能级跃迁测量技术的水平,决定“秒是铯–133 原子基态的两个超精细能级之间跃迁的辐射周期的 9192631770 倍的持续时间。

④热力学温度单位——开尔文(K)。1954 年第 16 届国际计量大会规定了热力学温度单位的定义;1967 年第 13 届计量大会通过以“开尔文”(符号 K)代替“开氏度”的名称,其正式定义为:

开尔文是水三相点热力学温度的 1/273.16。同时规定用单位开尔文及符号 K 表示温度间隔或温度差。

由于具体实现热力学温标非常困难，因而必须采用国际间协议性的温标——国际实用温标（见“国际实用温标”）。1927 年第 7 届国际计量大会通过了第一个国际温标，以后先后改用国际实用温标 1948 与 1968（即 IPTS-48 与 IPTS-68），现在使用的是国际实用温标 1990（IPTS-90），并以 T_{90}及 t_{90}分别表示热力学温度与摄氏温度，它们之间的关系为

$$t_{90}=(T_{90}-273.15\text{K})℃/\text{K}$$

⑤电流强度单位——安培（A）。虽然早在 1893 年在芝加哥召开的国际电学大会上提出使用“国际”安培和“国际”欧姆。但直到 1948 年第 9 届国际计量大会上才正式决定废除这些“国际”单位，而采用安培作为电学量的基本单位，其定义如下：

在真空中相距 1 米的两无限长而圆截面可忽略的平行直导线内通过一恒定电流，若这恒定电流使这两条导线每米长度上产生的力为 2×10^{-7}N，则此恒定电流的电流强度为 1 安培（A）。

⑥物质的量的单位——摩尔（mol）。摩尔这一单位是与化学中的“原子量”密切有关。早先，“原子量”是以氧元素的原子量为 16 作为标准来衡量的。以后改用同位素碳－12 作为标准。1971 年第 14 届国际计量大会通过了如下定义：

摩尔是一系统的物质的量。该系统中所包含的基本单元数与 0.012 千克碳－12 的原子数目相等。

⑦发光强度单位——坎德拉（cd）。以前曾使用过“新烛光”这一单位，1948 年改用“坎德拉”（符号 cd），1979 年第 16 届国际计量大会上对坎德拉作如下新定义：

坎德拉为一光源在给定方向的发光强度，该光源发出频率为 540×10^{12}Hz 的单色辐射，且在此方向上的辐射强度为（1/683）W 每球面度。

辅助单位目前只有弧度和球面度两个。弧度是一个圆内两条半径之间的平面角，这两条半径在圆周上截取的弧长与半径相等。球面度是一个立体角，其顶点位于球心，而它在球面上截取的面积等于以球半径为边长的正方形的面积。

导出单位是由基本单位及辅助单位导出的单位。对于已有专门名称和特有符号的导出单位，还可与基本单位一起组成其他的导出单位。

2. 厘米·克·秒制（CGS 制）及其他单位制

它是以厘米、克、秒分别作为长度、质量与时间的基本单位的单位制，以 CGS 表示。在 CGS 制中，可根据静电相互作用建立绝对静电制单位（CGSE），也可根据磁极之间相互作用建立绝对电磁制单位（CGSM）。若所有电学量单位均用 CGSE 单位，所有磁学量单位均用 CGSM 单位，就构成了绝对高斯制单位。需要注意的是，在 SI 制中电流强度的单位为基本单位，但在 CGS 制中它却仅是个导出单位。

由于在物理学中（特别是理论物理中）一直沿袭使用 CGS 制（特别是其中的高斯制），所以目前 CGS 制单位还在较多地被使用着。另外在英美等国家，英制单位仍被普遍使用，虽然这些国家已采用或准备采用国际单位制。

在粒子物理学中还在使用一种自然单位制，在该单位制中把基本物理常数 $\hbar$（普朗克常数除以 2π）及 c（光速）都取为 1，这样可以减少基本物理量，因而能把能量用作惟一的基本物理量。

二、量纲和量纲分析

（一）量纲与量纲式

由于物理量有基本量与导出量之分（见“物理学中的单位”），为了定性地描述物理量，特别是

定性地给出导出量与基本量间的概念,我们引入量纲这一概念。在不考虑数字因数时,表示一个量是由哪些基本量导出的或如何导出的式子,称为此量的量纲式。或者说,导出单位与基本单位间的依赖关系式称为该导出量的量纲式,并在该物理量的符号前面加上 dim(取 dimension 的前三个字母)表示之。而量纲式是由诸基本单位所对应的量纲(称为基本量纲)组成。由于国际单位制(SI)是建立在七个基本单位的基础上的:长度(m)、质量(kg)、时间(s)、电流(A)、物质的量(mol)、温度(K)和发光强度(cd)。任一物理量的单位均可由这七个单位导出。现把上述七个基本量纲依次用下述七个大写正体字母表示:L、M、T、I、N、Θ、J。例如,压强 p 的单位是 $\mathrm{N\cdot m^{-2}=kg\cdot s^{-2}\cdot m^{-1}}$,故压强 p 的量纲式是

$$\dim p=\mathrm{M\cdot T^{-2}\cdot L^{-1}} \tag{1}$$

(说明:在 GB3101-93 文件中,用 $\dim Q$ 表示物理量 Q 的量纲,但国际物理学家沿用的习惯是用 $[Q]$ 表示 Q 的量纲,故在(1)式中等号左边也可用 $[p]$ 表示)。总之,任一物理量的量纲式均是基本量纲的幂次单项式。量纲式常被用来换算单位或检验公式、结果是否正确。

(二)量纲分析法

由于任一物理方程等式两边的量纲应相同,则常可利用量纲式反推出物理方程,这就称为量纲分析法。由于满足相同量纲关系的方程式不止一个,所以最后还得由实验检验所导出方程的正确性。我们知道,很多物理公式均是由某些物理量、物理常量的幂次式和(无量纲)常数以及无量纲因子连续相乘后组成的单项式[例如麦克斯韦速率分布式是由物理量 m、T、v 与物理常量 k 的幂次式和无量纲因子 $\exp\left(-\dfrac{mv^2}{2kT}\right)$ 以及 π、数字连续相乘而成]。对于这类情况,其一般式可写为

$$b=\varphi c^{\alpha}d^{\beta}f^{\gamma}g^{\delta} \tag{2}$$

它表示物理量 b 是物理量 c、d、f、g 的幂函数与无量纲因子 φ 连续相乘而组成的单项式,其中 α、β、γ、δ 均为有理数(当然,对于一般情况,b 不一定恰与四个物理量及物理常量有关。可能与三个或五个甚至更多物理量有关)。而式(2)的量纲恒等式可写为

$$\dim b=\dim(\varphi c^{\alpha}d^{\beta}f^{\gamma}g^{\delta}) \tag{3}$$

这里有两种情况:(1)第一种情况适于组成物理量 b、c、d、f、g 的基本量纲数 m 大于或等于独立变量数 n,且 φ 为一常数(说明:虽然物理常量不是自变量,但物理常量的幂次数正是在量纲分析法中需要求得的,所以在量纲分析中,物理常量仍看做自变量)。例如,若式(3)的基本量纲为 M、T、L、Θ,且 φ 是常数。则只要把 b、c、d、f、g 的量纲式分别代入式(3),就把它化为由基本量纲的幂函数单项式所组成的恒等式。由恒等式两边每一基本量纲的幂指数之和分别相等可列出四个方程,从而解得 α、β、γ、δ。这样就可解出式(2),然后由实验检验其正确性,并定出常数 φ,则由量纲分析法构建物理方程已告完成。

下面以泊肃叶(Poiseuille)定律的导出为例说明如何应用量纲分析法。从动力学观点看来,要使管内流体作匀速运动,必须有外力来抵消黏性力,这个外力就是来自管子两端的压强差 Δp。现以长为 L,半径为 r 的水平直圆管中流体作层流流动为例来讨论不可压缩黏性流体(其黏度为 η)的流动,并把单位时间内流过管道截面上的流体体积 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}$ 称为体积流率。经过简单的物理分析即可知,在稳定流动中的体积流率 $\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}$ 仅与管道半径 r、黏度 η、管道中的压强梯度 $\dfrac{\Delta p}{L}$ 有关。若分别以 L、T、M 表示长度、时间、质量的量纲,上述各物理量的量纲可分别表示为:

$\dim\dfrac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t}=\mathrm{L^3\cdot T^{-1}}$;

$$\dim \frac{\Delta p}{L} = \mathrm{M} \cdot \mathrm{T}^{-2} \cdot \mathrm{L}^{-2}$$

$$\dim r = \mathrm{L}$$

$$\dim \eta = \mathrm{M} \cdot \mathrm{T}^{-1} \cdot \mathrm{L}^{-1}$$

设

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \propto r^{\alpha}\eta^{\beta}\left(\frac{\Delta p}{L}\right)^{\gamma} \tag{4}$$

将上述各物理量的量纲代入式(4),得

$$\mathrm{L}^3\mathrm{T}^{-1} = \mathrm{L}^{\alpha}\mathrm{M}^{\beta}\mathrm{T}^{-\beta}\mathrm{L}^{-\beta}\mathrm{M}^{\gamma}\mathrm{T}^{-2\gamma}\mathrm{L}^{-2\gamma}$$

等式两边各量纲上的指数都应相等,则有

$$\begin{cases} 3 = \alpha - \beta - 2\gamma & \text{对于 L} \\ -1 = -\beta - 2\gamma & \text{对于 T} \\ \beta + \gamma = 0 & \text{对于 M} \end{cases}$$

从三个恒等式可解出 $\alpha = 4, \beta = -1, \gamma = 1$,故

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} \propto r^4 \eta^{-1} \frac{\Delta p}{L}$$

或

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = \kappa r^4 \eta^{-1} \frac{\Delta p}{L}$$

实验测出 $\kappa = \frac{\pi}{8}$,因而泊肃叶定律可表示为

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = \frac{\pi r^4 \Delta p}{8\eta L} \tag{5}$$

第二种情况是基本量纲数 m 小于独立的变量数 n,这时要借用 Π 定理。Π 定理可以通俗地表述如下:

设某物理问题涉及 n 个物理量(包括物理常量)$P_1, P_2, \cdots, P_n$,而我们所选的单位制中有 m 个基本量($n > m$),则由此可组成 $n - m$ 个无量纲量 Π_1、Π_2、$\cdots$,Π_{n-m}。这时在物理量 $P_1, P_2, \cdots, P_n$ 之间存在的函数关系式

$$f(P_1, P_2, \cdots, P_n) = 0 \tag{6}$$

就可表达成相应的无量纲形式:

$$F(\Pi_1, \Pi_2, \cdots, \Pi_{n-m}) = 0 \tag{7}$$

或者从上式把 Π_1 解出来,从而表示为

$$\Pi_1 = \Phi(\Pi_2, \cdots, \Pi_{n-m}) \tag{8}$$

下面举一个 $n - m = 1$,因而要引入一个无量纲因子的例子。若一定形状的物体以速率 v 在黏性流体中运动,现要求出物体所受的黏性阻力 f(忽略重力因素)。显然,f 决定于物体的形状,在形状相似(如:同为球体或同为长直圆管)时,它又决定于物体的线度(例如半径)r、运动速率 v、流体的密度 ρ 及黏度 η。可见其自变量数是 4,但基本量纲为 M(质量)、L(长度)、T(时间),只有 3 个。应该还有一个无量纲因子,现在先写出上述五个物理量的量纲式

$\dim f = \mathrm{MLT}^{-2}$;$\dim r = \mathrm{L}$;

$\dim v = \mathrm{LT}^{-1}$

$\dim \rho = \mathrm{ML}^{-3}$;$\dim \eta = \mathrm{ML}^{-1}\mathrm{T}^{-1}$

设

$$f \sim r^{\alpha}v^{\beta}\rho^{\gamma}\eta^{\delta}$$

由量纲关系可求得

$$\begin{cases}\gamma+\delta=1\\ \beta+\delta=2\\ \alpha+\beta-3\gamma-\delta=1\end{cases}\longrightarrow\begin{cases}\delta \quad \text{不定}\\ \alpha=2-\delta\\ \beta=2-\delta\\ \gamma=1-\delta\end{cases}$$

由此可得

$$f\sim\rho v^2 r^2\left(\frac{\rho v r}{\eta}\right)^{-\delta}=\rho v^2 r^2 Re^{-\delta}$$

其中

$$Re=\frac{\rho v r}{\eta} \tag{9}$$

称为雷诺数,它是无量纲因子,在流体力学中有重要的地位。由于 δ 原则上可取任意值,故黏性阻力的普遍公式为

$$f=C(Re)\rho v^2 r^2 \tag{10}$$

其中 $C(Re)$ 称为阻力系数,它是雷诺数 Re 的函数,其函数形式与物体的形状及 Re 的取值范围密切相关,可由实验来确定。对于 $Re<1$ 的低速流动,$C(Re)$ 大致和 Re 成正比,设比例系数为 C_0,这时

$$f=\frac{C_0}{Re}\rho v^2 r^2=C_0\eta v r$$

C_0 决定于物体的形状。例如对于球体,则线度 r 就是球的半径,且 $C_0=6\pi$,故 $f=6\pi\eta r v$ (11)
这就是斯托克斯公式。

量纲分析法的关键是要把握住与问题有关的主要物理量和基本常数(如果在这方面有所遗漏就会导致失败)。如果所涉及的物理量较少,而且不存在无量纲因子,就可设想一个幂函数的关系,然后进行量纲分析,并解出各未知幂次的数值,最后还应与实验结果比较以鉴别所得公式是否正确,并定出比例常数。从以上例子可以看出,用量纲分析法有时会很简便,甚至不需知道定律和物理机制的细节即可建立一定的关系,得到一些有用的信息,并作定性分析,也能对公式的建立起指导作用。在学习过程中经常利用量纲分析法,也能培养类比和联想的能力,这是一种十分有用的物理思考方法。

基本单位 fundamental units 见“物理学中的单位制”。

导出单位 derived units 见“物理学中的单位制”。

国际单位制(SI) system of international units 见“物理学中的单位制”。

MKS 制 MKS system of units 即米·千克·秒制,见“物理学中的单位制”。

CGS 制 CGS system of units 即厘米·克·秒制,见“物理学中的单位制”。

CGSE 制 CGSE system of units 即绝对静电单位制,是在 CGS 制基础上根据静电相互作用建立的单位制。见“物理学中的单位制”。

CGSM 制 CGSM system of units 即绝对电磁单位制,是在 CGS 制基础上根据磁极之间相互作用建立的单位制,见“物理学中的单位制”。

自然单位制 natural unit system 把普朗克常数 $\hbar(=h/2\pi)$ 及光速 c 取为 1 时所建立的单位制,见“物理学中的单位制”。

7 个附表:

表 1　SI 基本单位

基本量	单位名称		单位符号	
	中文	英文	中文	SI
长度	米	meter	米	m
质量	千克(公斤)	kilogram	千克	kg
时间	秒	second	秒	s
电流	安培	ampere	安[培]	A
热力学温度	开尔文	kelvin	开[尔文]	K
物质的量	摩尔	mole	摩[尔]	mol
发光强度	坎德拉	candela	坎[德拉]	cd

表 2　SI 导出单位

导出量	单位名称		单位符号	
	中文	英文	中文	SI
面积	平方米	square meter	米^2	m^2
体积	立方米	cubic meter	米^3	m^3
速率,速度	米每秒	meter per second	米/秒	m/s
加速度	米每平方秒	meter per second squared	米/秒^2	m/s^2
波数	每米	reciprocal meter	1/米	m^{-1}
密度	千克每立方米	kilogram per cubic meter	千克/米^3	kg/m^3
比容[比体积]	立方米每千克	cubic meter per kilogram	米^3/千克	m^3/kg
电流密度	安[培]每平方米	ampere per square meter	安/米^2	A/m^2
磁场强度	安[培]每米	ampere per meter	安/米	A/m
[物质的量]浓度	摩[尔]每立方米	mole per cubic meter	摩/米^3	mol/m^3
[光]亮度	坎[德拉]每平方米	candela per square meter	坎/米^2	cd/m^2

表 3　SI 中具有专门名称的导出单位

导出量	单位名称		单位符号		用 SI 导出单位表示	用 SI 基本单位表示
	中文	英文	中文	SI		
平面角	弧度	radian	弧度	rad		
立体角	球面度	steradian	球面度	sr		
频率	赫[兹]	hertz	赫	Hz		s^{-1}
力	牛[顿]	newton	牛	N		$m\cdot kg\cdot s^{-2}$
压力,应力	帕[斯卡]	Pascal	帕	Pa	N/m^2	$m^{-1}\cdot kg\cdot s^{-2}$
能,功,热量	焦[耳]	joule	焦	J	N·m	$m^2\cdot kg\cdot s^{-2}$
功率,辐射通量	瓦[特]	watt	瓦	W	J/s	$m^2\cdot kg\cdot s^{-3}$
电荷,电量	库[仑]	coulomb	库	C		s·A
电位差,电动力	伏[特]	volt	伏	V	W/A	$m^2\cdot kg\cdot s^{-3}\cdot A^{-1}$
电容	法[拉]	farad	法	F	C/V	$m^{-2}\cdot kg^{-1}\cdot s^4\cdot A^2$
电阻	欧[姆]	ohm	欧	Ω	V/A	$m^2\cdot kg\cdot s^{-3}\cdot A^{-2}$
电导	西[门子]	siemens	西	S	A/V	$m^{-2}\cdot kg^{-1}\cdot s^3\cdot A^2$
磁通量	韦[伯]	weber	韦	wb	V·s	$m^2\cdot kg\cdot s^{-2}\cdot A^{-1}$
磁通[量]密度	特[斯拉]	tesla	特	T	Wb/m^2	$Kg\cdot s^{-2}\cdot A^{-1}$

导出量	单位名称		单位符号		用SI导出单位表示	用SI基本单位表示
	中文	英文	中文	SI		
电感	亨[利]	henry	亨	H	Wb/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-2}$
摄氏温度	摄氏度	degree Celsius		℃		K
光通量	流[明]	lumen	流	lm	cd•sr	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot cd$
[光]照度	勒[克斯]	lux	勒	lx	lm/m^2	$m^2 \cdot m^{-4} \cdot cd$
[放射性]活度	贝可[勒尔]	becquerel	贝可	Bq		s^{-1}
吸收剂量,比授[予]能	戈[瑞]	gray	戈	Gy	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$
剂量当量	希[沃特]	sievert	希	Sy	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2}$

表4 SI中用导出单位表示的导出单位

导出量	单位名称		单位符号	
	中文	英文	中文	SI
运动黏度	帕[斯卡]每秒	pascal per second	帕/秒	P/s
力矩	牛[顿]米	newton meter	牛•米	N•m
表面张力	牛[顿]每米	newton per meter	牛/米	N/m
角速度	弧度每秒	radian per second	弧度/秒	rad/s
角加速度	弧度每平方秒	radian per second squared	弧度/秒^2	rad/s^2
热通[量]密度辐[射]照度	瓦[特]每平方米	watt per square meter	瓦/米^2	W/m^2
热容量,熵	焦[耳]每开[尔文]	joule per kelvin	焦/开	J/K
比热容,比熵	焦[耳]每千克开[尔文]	joule per kilogram kelvin	焦/千克开	J/kgK
比内能	焦[耳]每千克	joule per kilogram	焦/千克	J/kg
热导率[导热系数]	瓦[特]每米开[尔文]	watt per meter kelvin	瓦/米开	W/mK
能量密度	焦[耳]每立方米	joule per cubic meter	焦/米^3	J/m^3
电场强度	伏每米	volt per meter	伏/米	V/m
电荷[体]密度	库[仑]每立方米	coulomb per cubic meter	库/米^3	C/m^3
电通[量]密度,电位移	库[仑]每平方米	coulomb per square meter	库/米^2	C/m^2
介电常数,(电容率)	法[拉]每米	farad per meter	法/米	F/m
磁导率	亨[利]每米	henry per meter	亨/米	H/m
摩尔内能	焦[耳]每摩[尔]	joule per mole	焦/摩	J/mol
摩尔熵,摩尔热容	焦[耳]每摩[尔]开[尔文]	joule per molekelvin	焦/摩开	J/K•mol
照射量	库[仑]每千克	coulomb per kilogram	库/千克	C/kg
吸收剂量率	戈[瑞]每秒	gray per second	戈/秒	Gy/s
辐[射]强度	瓦[特]每立体角	watt per steradian	瓦/立体角	W/sr
辐[射]亮度,辐射度	瓦[特]每立体角平方米	watt per square meter steradian	瓦/米^{2}立体角	W/m^2sr

表 5　SI 词头

因数	词头名称	符号		因数	词头名称	符号	
		中文	SI			中文	SI
10^{24}	Yotta	尧	Y	10^{-1}	deci	分	d
10^{21}	Zetta	泽	Z	10^{-2}	centi	厘	c
10^{18}	Exa	艾	E	10^{-3}	milli	毫	m
10^{15}	Peta	拍	P	10^{-6}	micro	微	μ
10^{12}	Tera	太	T	10^{-9}	nano	纳	n
10^{9}	Giga	吉	G	10^{-12}	pico	皮	p
10^{6}	Mega	兆	M	10^{-15}	femto	飞	f
10^{3}	kilo	千	k	10^{-18}	atto	阿	a
10^{2}	hecto	百	h	10^{-21}	zepto	仄	z
10^{1}	deca	十	da	10^{-24}	yocto	幺	y

表 6　非国际单位制的常用单位

单位名称	符号	在 SI 单位中的值
分	min	$1\,\text{min}=60\,\text{s}$
时	h	$1\,\text{h}=60\,\text{min}=3600\,\text{s}$
天	d	$1\,\text{d}=24\,\text{h}=86400\,\text{s}$
度(角度)		$1^{\circ}=(\pi/180)$弧度
分(角度)		$1'=(1/60)^{\circ}=(\pi/10800)$弧度
秒(角度)		$1''=(1/60)'=(\pi/648000)$弧度
升	L	$1\ \text{L}=1\ \text{dm}^3=10^{-3}\ \text{m}^3$
吨	t	$1\ \text{t}=10^3\ \text{kg}$
奈培	Np	$1\ \text{Np}=1$
贝尔	B	$1\ \text{B}=(1/2)\ln 10\,\text{Np}$
电子伏	eV	$1\ \text{eV}\approx 1.60218\times 10^{-19}\ \text{J}$
(统一的)原子质量单位	u	$1\ \text{u}\approx 1.66054\times 10^{-27}\ \text{kg}$
天文单位	ua	$1\ \text{ua}=1.49598\times 10^{11}\ \text{m}$
海里	n mile	$1\ \text{n mile}=1852\ \text{m}$
节	kn	$1\ \text{kn}=\text{n mile/h}=(1852/3600)\,\text{m/s}$
公亩	a	$1\ \text{a}=1\ \text{dam}^2=10^2\text{m}^2$
公顷	ha	$1\ \text{ha}=1\ \text{hm}^2=10^4\text{m}^2$
巴	bar	$1\ \text{bar}=0.1\ \text{MPa}=100\ \text{kPa}=1000\ \text{hPa}=10^5\text{Pa}$
埃	Å	$1\,\text{Å}=0.1\,\text{nm}=10^{-10}\text{m}$
靶恩	b	$1\ \text{b}=100\ \text{fm}^2=10^{-28}\text{m}^2$
居里	Ci	$1\ \text{Ci}=3.7\times 10^{10}\text{Bq}$
伦琴	R	$1\ \text{R}=2.58\times 10^{-4}\ \text{C/kg}$
拉德	rad	$1\ \text{rad}=1\ \text{cGy}=10^{-2}\text{Gy}$
雷姆	rem	$1\ \text{rem}=1\ \text{cSv}=10^{-2}\text{Sv}$

表 7　国际单位制(SI)与厘米克秒制(CGS)主要单位对照表

单位名称	国际制	符号	厘米克秒制	符号	数值关系
长　度	米	m	厘米	cm	1 m=100 cm
质　量	千克	kg	克	g	1 kg=1 000g
时　间	秒	s	秒	s	
电流强度	安培	A			$1A=10^{-1}$emu
温　度	开尔文	K	开尔文	K	
物质的量	摩尔	mol	摩尔	mol	
发光强度	坎德拉	cd	熙提	sb	$1cd=1\ sbcm^2$
力	牛顿	N	达因	dyn	$1N=10^5$dyn
压力、应力	帕斯卡	Pa(N/m^2)	泊	P	1 Pa=10P/s
能、功、热量	焦耳	J(N·m)	尔格	erg	$1J=10^7$erg
电量、电荷	库仑	C			$1C=10^{-1}$emu
电位、电压、电动势	伏特	V			$1V=10^8$emu
电　容	法拉	F			$1F=10^{-9}$emu
电　阻	欧姆	Ω			$1\Omega=10^9$emu
电　导	西门子	S			$1S=10^{-9}$emu
磁通量	韦伯	Wb	麦克斯韦	Mx	1Wb 相当于 10^8Mx
磁感应强度	特斯拉	T	高斯	Gs	1T 相当于 10^4Gs
电　感	亨利	H(Wb/A)			$1H=10^9$emu
光通量	流明	lm			
光照度	勒克斯	lx	辐透	ph	$1\ lx=10^{-4}$ph

注:表中的 CGS 制中专列出名称的均为 CGSM 制,读者可以根据 CGSE 与 CGSM 制的关系,变换为 CGSE 制.

附录三　基本物理常数

#	常　　数	符号	数值	单位
1	真空中的光速	c	299792458	$m\ s^{-1}$
2	真空导磁率	μ_0	1.25663706143592e−06	$N\ A^{-2}$
3	真空介电常数	ε_0	8.854187817e−12	$F\ m^{-1}$
4	牛顿引力常数	G	6.67259e−11±8.5e−15	$m^3\ kg^{-1}\ s^{-2}$
5	普朗克常数	h	6.6260755e−34±4.0e−40	J s
6	以电子伏为单位的普朗克常数		4.1356692e−15±1.2e−21	eV s
7	h−bar	$\hbar$	1.05457266e−34±6.3e−41	J s
8	以电子伏为单位的 $\hbar$		6.582122e−16±2.0e−22	eV s
9	普朗克质量	m_p	2.17671e−08±1.4e−12	kg
10	普朗克长度	l_p	1.61605e−35±1.0e−39	m
11	普朗克时间	t_p	5.39056e−44±3.4e−48	s
12	基本电荷	e	1.60217733e−19±4.9e−26	C
13	磁通量子	Φ_0	2.06783461e−15±6.1e−22	Wb
14	约瑟夫森频率-电压比	$2e/h$	483597670000000±1.4e+08	$V^{-1}s^{-1}$
15	量子霍尔电导	e^2/h	3.87404614e−05±1.7e−12	Ω^{-1}
16	量子霍尔电阻	R_H	25812.8056±0.0012	Ω
17	玻尔磁子	μ_B	9.2740154e−24±3.1e−30	$J\ T^{-1}$
18	以电子伏为单位的玻尔磁子		5.78838263e−05±5.2e−12	$eV\ T^{-1}$
19	以赫兹为单位的玻尔磁子		13996241800±4200	$T^{-1}\ s^{-1}$
20	以波数为单位的玻尔磁子		46.686437±1.4e−05	$m^{-1}\ T^{-1}$
21	以开尔文为单位的玻尔磁子		0.6717099±5.7e−06	$K\ T^{-1}$
22	核磁子	μ_N	5.0507866e−27±1.7e−33	$J\ T^{-1}$
23	以电子伏为单位的核磁子		3.15245166e−08±2.8e−15	$eV\ T^{-1}$
24	以赫为单位的核磁子		7622591.4±2.3	$T^{-1}\ s^{-1}$
25	以波数为单位的核磁子		0.0254262281±7.7e−09	$m^{-1}\ T^{-1}$
26	以开尔文为单位的核磁子		0.0003658246±3.1e−09	$K\ T^{-1}$
27	精细结构常数	α	0.00729735308±3.3e−10	
28	精细结构常数的倒数	α^{-1}	137.0359895±6.1e−06	
29	里德伯常数	R_∞	10973731.534±0.013	m^{-1}
30	以赫兹为单位的里德伯常数		3.2898419499e+15±3.9e+06	s^{-1}
31	以焦耳为单位的里德伯常数		2.1798741e−18±1.3e−24	J
32	以电子伏为单位的里德伯常数		13.6056981±4.0e−06	eV
33	玻尔半径	a_0	5.29177249e−11±2.4e−18	m

续表

#	常　　数	符号	数值	单位
34	哈特里能量	E_H	4.3597482e－18±2.6e－24	J
35	以电子伏为单位的哈特里能量		27.2113961±8.1e－06	eV
36	环流量子	$h/2m_e$	0.000363694807±3.3e－11	$m^2\ s^{-1}$
37	电子质量	m_e	9.1093897e－31±5.4e－37	kg
38	以 u 为单位的电子质量		0.000548579903±1.3e－11	u
39	以电子伏为单位的电子质量		510999.06±0.15	eV
40	电子-介子质量比	m_e/m_μ	0.00483633218±7.1e－10	
41	电子-质子质量比	m_e/m_p	0.000544617013±1.1e－11	
42	电子-氘核质量比	m_e/m_d	0.000272443707±6e－12	
43	电子-α粒子质量比	m_e/m_α	0.000137093354±3e－12	
44	电子荷质比	$-e/m_e$	－175881962000∓53000	$C\ kg^{-1}$
45	电子摩尔质量	$M_e, M(e)$	5.48579903e－07±1.3e－14	$kg\ mol^{-1}$
46	电子康普顿波长	λ_C	2.42631058e－12±2.2e－19	m
47	$\lambda_C/2\pi$		3.86159323e－13±3.5e－20	m
48	经典电子半径	r_e	2.81794092e－15±3.8e－22	m
49	汤姆孙截面	σ_e	6.6524616e－29±1.8e－35	m^2
50	电子磁矩	μ_e	9.2847701e－24±3.1e－30	$J\ T^{-1}$
51	以玻尔磁子为单位的电子磁矩	μ_e/μ_B	1.001159652193±1.0e－11	
52	以核磁子为单位的电子磁矩	μ_e/μ_N	1838.282±3.7e－05	
53	电子反常磁矩	a_e	0.001159652193±1.0e－11	
54	电子 g 因子	g_e	2.002319304386±2.0e－11	
55	电子-μ子磁矩比	μ_e/μ_μ	206.766967±3.0e－05	
56	电子-质子磁矩比	μ_e/μ_p	658.2106881±6.6e－06	
57	μ子质量	m_μ	1.8835327e－28±1.1e－34	kg
58	以 u 为单位的μ子质量		0.113428913±1.7e－08	u
59	以电子伏为单位的μ子质量		105658389±34	eV
60	μ子-电子质量比	m_μ/m_e	206.768262±3.0e－05	
61	μ子摩尔质量	$M(\mu), M_\mu$	0.000113428913±1.7e－11	$kg\ mol^{-1}$
62	μ子磁矩	μ_μ	4.4904514e－26±1.5e－32	$J\ T^{-1}$
63	以玻尔磁子为单位的μ子磁矩	μ_μ/μ_B	0.00484197097±7.1e－10	
64	以核磁子为单位的μ子磁矩	μ_μ/μ_N	8.8905981±1.3e－06	
65	μ子反常磁矩	a_μ	0.001165923±8.4e－09	
66	μ子 g 因子	g_μ	2.002331846±1.7e－08	
67	μ子-质子磁矩比	μ_μ/μ_p	3.18334547±4.7e－07	
68	质子质量	m_p	1.6726231e－27±1.0e－33	kg

续表

#	常　　数	符号	数值	单位
69	以 u 为单位的质子质量		1.00727647±1.2e−08	u
70	以电子伏为单位的质子质量		938272310±280	eV
71	质子-电子质量比	m_p/m_e	1836.152701±3.7e−05	
72	质子-μ子质量比	m_p/m_μ	8.8802444±1.3e−06	
73	质子荷质比	e/m_p	95788309±29	$C\ kg^{-1}$
74	质子摩尔质量	$M(p)$, M_p	0.00100727647±1.2e−11	$kg\ mol^{-1}$
75	质子康普顿波长	$\lambda_{c,p}$	1.32141002e−15±1.2e−22	m
76	质子磁矩	μ_p	1.41060761e−26±4.7e−33	$J\ T^{-1}$
77	以玻尔磁子为单位的质子磁矩	μ_p/μ_B	0.001521032202±1.5e−11	
78	以核磁子为单位的质子磁矩	μ_p/μ_N	2.792847386±6.3e−08	
79	纯水中球形样品(25℃)的质子抗磁屏蔽修正	σ_{H_2O}	2.5689e−05±1.5e−08	
80	屏蔽的质子磁矩(H_2O,球形样品,25℃)	μ'_p	1.41057138e−26±4.7e−33	$J\ T^{-1}$
81	以玻尔磁子为单位的屏蔽的质子磁矩	μ'_p/μ_B	0.001520993129±1.7e−11	
82	以核磁子为单位的屏蔽的质子磁矩	μ'_p/μ_N	2.792775642±6.4e−08	
83	质子旋磁比	γ_p	267522128±81	$T^{-1}\ s^{-1}$
84	$\gamma_p/2\pi$	$\gamma_p/2\pi$	42577469±13	$T^{-1}\ s^{-1}$
85	未修正的质子磁旋比(H_2O,球形样品,25℃)	γ'_p	267515255±81	$T^{-1}\ s^{-1}$
86	$\gamma'_p/2\pi$	$\gamma'_p/2\pi$	42576375±13	$T^{-1}\ s^{-1}$
87	中子质量	m_n	1.6749286e−27±1.0e−33	kg
88	以 u 为单位的中子质量		1.008664904±1.4e−08	u
89	以电子伏为单位的中子质量		939565630±280	eV
90	中子-电子质量比	m_n/m_e	1838.683662±4.0e−05	
91	中子-质子质量比	m_n/m_p	1.001378404±9e−09	
92	中子摩尔质量	$M(n)$, M_n	0.001008664904±1.4e−11	$kg\ mol^{-1}$
93	中子康普顿波长	$\lambda_{C,n}$	1.3195911e−15±1.2e−22	m
94	中子磁矩	μ_n	9.6623707e−27±4.0e−33	$J\ T^{-1}$
95	以玻尔磁子为单位的中子磁矩	μ_n/μ_B	0.00104187563±2.5e−10	
96	以核磁子为单位的中子磁矩	μ_n/μ_N	1.91304275±4.5e−07	
97	中子-电子磁矩比	μ_n/μ_e	0.00104066882±2.5e−10	
98	中子-质子磁矩比	μ_n/μ_p	0.68497934±1.6e−07	

续表

#	常　　数	符号	数值	单位
99	氘核质量	m_d	3.343586e－27±2.0e－33	kg
100	以 u 为单位的氘核质量		2.013553214±2.4e－08	u
101	以电子伏为单位的氘核质量		1875613390±570	eV
102	氘核-电子质量比	m_d/m_e	3670.483014±7.5e－05	
103	氘核-质子质量比	m_d/m_p	1.999007496±6e－09	
104	氘核摩尔质量	$M(d)$，M_d	0.002013553214±2.4e－11	kg mol^{-1}
105	氘核磁矩	μ_d	4.3307375e－27±1.5e－33	J T^{-1}
106	以玻尔磁子为单位的氘核磁矩	μ_d/μ_B	0.0004669754479±9.1e－12	
107	以核磁子为单位的氘核磁矩	μ_d/μ_N	0.85743823±2.4e－08	
108	氘核-电子磁矩比	μ_d/μ_e	0.000466434546±9.1e－12	
109	氘核-质子磁矩比	μ_d/μ_p	0.3070122035±5.1e－09	
110	阿伏伽德罗常数	N_A	6.0221367e＋23±3.6e＋17	mol^{-1}
111	原子质量常数	m_u	1.6605402e－27±1.0e－33	kg
112	以电子伏为单位的原子质量常数		931494320±280	eV
113	法拉第常数	F	96485.309±0.029	C mol^{-1}
114	摩尔普朗克常数	$N_A h$	3.99031323e－10±3.6e－17	J s mol^{-1}
115	$N_A hc$	$N_A hc$	0.11962658±1.1e－07	J m mol^{-1}
116	摩尔气体常数	R	8.31451±7.0e－05	J $mol^{-1}K^{-1}$
117	玻尔兹曼常数	k	1.380658e－23±1.2e－28	J K^{-1}
118	以电子伏为单位的玻尔兹曼常数		8.617385e－05±7.3e－10	eV K^{-1}
119	以赫为单位的玻尔兹曼常数		20836740000±180000	$K^{-1}s^{-1}$
120	以波数为单位的玻尔兹曼常数		69.50387±0.00059	$m^{-1}K^{-1}$
121	摩尔体积(理想气体)	V_m	0.0224141±1.9e－07	m^3mol^{-1}
122	洛施密特常数	n_0	2.686763e＋25±2.3e＋20	m^{-3}
123	斯忒藩-玻尔兹曼常数	σ	5.67051e－08±1.9e－12	W $m^{-2}K^{-4}$
124	第一辐射常数	c_1	3.7417749e－16±2.2e－22	W m^2
125	第二辐射常数	c_2	0.01438769±1.2e－07	m K
126	维恩位移定律常数	b	0.002897756±2.4e－08	m K
127	电子伏特	eV	1.60217733e－19±4.9e－26	J
128	原子质量单位	u	1.6605402e－27±1.0e－33	kg
129	标准大气压	atm	101325	Pa
130	标准重力加速度	g_n	9.80665	m s^{-2}
131	BIPM 保存欧姆 $\Omega_{69-BI}\Omega_{BI85}\equiv\Omega_{69-BI}$(1985 年 1 月 1 日)	Ω_{BI85}	1－1.563e－6±5.0e－08	Ω

续表

#	常　　数	符号	数值	单位
132	$\Omega_{69-\mathrm{BI}}$的漂移速率	$\frac{\mathrm{d}\Omega_{69-\mathrm{BI}}}{\mathrm{dt}}$	−0.0566±−0.0015	$\mu\Omega$/yr
133	BIPM 保存伏特 $V_{76-\mathrm{BI}} \equiv$ 483594GHz($h/2e$)	$V_{76-\mathrm{BI}}$	1−7.59e−6±3.0e−07	V
134	BIPM 保存安培 $A_{\mathrm{BIPM}} = V_{76-\mathrm{BI}}/\Omega_{69-\mathrm{BI}}$	A_{BI85}	1−6.03e−6±3.0e−07	A
135	AA^*:	Å*	1.00001481e−10±9.2e−17	m
136	硅的晶格间距(真空中,22.5℃)	a	5.4310196e−10±1.1e−16	m
137	(220)硅的晶格间距	d_{220}	1.9201554e−10±4.0e−17	m
138	硅的摩尔体积	$V_{\mathrm{m}}(\mathrm{Si})$	1.20588179e−05±8.9e−12	$\mathrm{m^3mol^{-1}}$

参见:MIT physical constant。

http://web.mit.edu/3.091/www/constantts.html;

http://physics.nist.gov/cun/constands/index.html。

附录四　能量转换因子

	J	kg	m^{-1}	Hz
1J＝	1	$1/\{c^2\}$ 1.11265006 $\times10^{-17}$	$1/\{hc\}$ 5.0341125(30) $\times10^{24}$	$1/\{h\}$ 1.50918897(90) $\times10^{33}$
1kg＝	$\{c^2\}$ 8.987551787 $\times10^{16}$	1	$\{c/h\}$ 4.5244347(27) $\times10^{41}$	$\{c^2/h\}$ 1.35639140(81) $\times10^{50}$
$1m^{-1}$＝	$\{hc\}$ 1.9864475(12) $\times10^{-25}$	$\{h/c\}$ 2.2102209(13) $\times10^{42}$	1	$\{c\}$ 299792458
1Hz＝	$\{h\}$ 6.6260755(40) $\times10^{-34}$	$\{h/c^2\}$ 7.3725032(44) $\times10^{-51}$	$1/\{c\}$ 3.335640952 $\times10^{-9}$	1
1K＝	$\{k\}$ 1.380658(12) $\times10^{-23}$	$\{k/c^2\}$ 1.536189(13) $\times10^{-40}$	$\{k/hc\}$ 69.50387(59)	$\{k/h\}$ 2.083674(18) $\times10^{10}$
1eV＝	$\{e\}$ 1.60217733(49) $\times10^{-19}$	$\{e/c^2\}$ 1.78266270(54) $\times10^{-36}$	$\{e/hc\}$ 806554.10(24)	$\{e/h\}$ 2.41798836(72) $\times10^{14}$
1u＝	$\{m_uc^2\}$ 1.49241909(88) $\times10^{-10}$	$\{m_u\}$ 1.6605402(10) $\times10^{-27}$	$\{m_uc/h\}$ 7.51300563(67) $\times10^{14}$	$\{m_uc^2/h\}$ 2.25234242(20) $\times10^{23}$
1Eh＝	$\{2R_\infty hc\}$ 4.3597482(26) $\times10^{-18}$	$\{2R_\infty h/c\}$ 4.8508741(29) $\times10^{-35}$	$\{2R_\infty\}$ 21947463.067(26)	$\{2R_\infty c\}$ 6.5796838999(78) $\times10^{15}$

续表

	K	eV	u	Eh
1J=	$1/\{k\}$ 7.242924(61) $\times 10^{22}$	$1/\{e\}$ 6.2415064(19) $\times 10^{18}$	$1/\{m_u c^2\}$ 6.7005308(40) $\times 10^{9}$	$1/\{2R_\infty hc\}$ 2.2937104(14) $\times 10^{17}$
1kg=	$\{c^2/k\}$ 6.509616(55) $\times 10^{39}$	$\{c^2/e\}$ 5.6095862(17) $\times 10^{35}$	$1/\{m_u\}$ 6.0221367(36) $\times 10^{26}$	$\{c/2R_\infty h\}$ 2.0614841(12) $\times 10^{34}$
1m^{-1}=	$\{hc/k\}$ 0.01438769(12)	$\{hc/e\}$ 1.23984244(37) $\times 10^{-6}$	$\{h/m_u c\}$ 1.33102522(12) $\times 10^{-15}$	$1/\{2R_\infty\}$ 4.5563352672(54) $\times 10^{-5}$
1Hz=	$\{h/k\}$ 4.799216(41) $\times 10^{-11}$	$\{h/e\}$ 4.1356692(12) $\times 10^{-15}$	$\{h/m_u c^2\}$ 4.43982224(40) $\times 10^{-24}$	$1/\{2R_\infty c\}$ 1.5198298508(18) $\times 10^{-16}$
1K=	1	$\{k/e\}$ 8.617385(73) $\times 10^{-5}$	$\{k/m_u c^2\}$ 9.251140(78) $\times 10^{-14}$	$\{k/2R_\infty hc\}$ 3.166829(27) $\times 10^{-6}$
1eV=	$\{e/k\}$ 11604.45(10)	1	$\{e/m_u c^2\}$ 1.07354385(33) $\times 10^{-9}$	$\{e/2R_\infty hc\}$ 0.036749309(11)
1u=	$\{m_u c^2/k\}$ 1.0809478(91) $\times 10^{13}$	$\{m_u c^2/e\}$ 931.49432(28) $\times 10^{6}$	1	$\{m_u c/2R_\infty h\}$ 3.42317725(31) $\times 10^{7}$
1Eh=	$\{2R_\infty hc/k\}$ 3.157733(27) $\times 10^{3}$	$\{2R_\infty hc/e\}$ 27.2113961(81)	$\{2R_\infty h/m_u c\}$ 2.92126269(26) $\times 10^{-8}$	1

说明：(1)此表选自：1986 年基本物理常数国际推荐值，沈乃澂编译。北京：科学出版社，1987。

(2)此表同一行中的各项是相等的；每列顶部的单位适用于以下的全部数值。例如：1eV $=806544.10\text{m}^{-1}$。

附录五　高斯单位制和SI单位制的电磁学单位和公式换算

表1　两种单位制符号替换表

物　理　量	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
光速	c	$1/\sqrt{\mu_0\varepsilon_0}$
电场强度、电势、电压	$\boldsymbol{E},\Phi,\boldsymbol{V}$	$\sqrt{4\pi\varepsilon_0}(\boldsymbol{E},\Phi,\boldsymbol{V})$
电位移矢量	D	$\sqrt{\frac{4\pi}{\varepsilon_0}}\boldsymbol{D}$
电荷密度,电荷,电流密度,电流强度,电极化强度	$\rho,q,\boldsymbol{J},I,\boldsymbol{P}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0}}(\rho,q,\boldsymbol{J},I,P)$
磁感应强度	$\boldsymbol{B}$	$\sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}}\boldsymbol{B}$
磁场强度	$\boldsymbol{H}$	$\sqrt{\frac{4\pi}{\mu_0}}\boldsymbol{H}$
磁化强度	$\boldsymbol{M}$	$\sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}}\boldsymbol{M}$
电导率	σ	$\sigma/4\pi\varepsilon_0$
介电常数	ε	$\varepsilon/\varepsilon_0$
磁导率	μ	μ/μ_0
电感	L	$4\pi\varepsilon_0 L$
电容	C	$C/4\pi\varepsilon_0$
电阻	R	$4\pi\varepsilon_0 R$

表2　两种单位制电磁学量换算表

物理量	符号	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
长度	l	1厘米(cm)	10^{-2}米(m)
质量	m	1克(g)	10^{-3}千克(kg)
时间	t	1秒(s)	1秒(s)
力	$\boldsymbol{F}$	1达因(dyn)	10^{-5}牛顿(N)
能量、功	E,W,U	1尔格(erg)	10^{-7}焦耳(J)
功率	P	1尔格/秒(erg/s)	10^{-7}瓦特(W)
电荷	q	1静电库仑	$\frac{1}{3}\times10^{-9}$库仑(C)
电荷密度	ρ	1静电库仑/厘米^3	$\frac{1}{3}\times10^{3}$库仑/米^3(C/m^3)
电流强度	$\boldsymbol{I}$	1静电安培	$\frac{1}{3}\times10^{-9}$安培(A)
电流密度	$\boldsymbol{J}$	1静电安培/厘米^2	$\frac{1}{3}\times10^{-5}$安培/米^2(A/m^2)
电场强度	$\boldsymbol{E}$	1静电伏特/厘米	3×10^{4}伏特/米(V/m)

续表

物理量	符号	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
电势		1 静电伏特	300 伏特(V)
电极化强度	$\boldsymbol{P}$	1 偶极矩/厘米^2	$\frac{1}{3}\times10^{-5}$库仑/米^2(C/m^2)
电位移矢量	$\boldsymbol{D}$	1 静电伏特/厘米 1 静电库仑/厘米^2	$\frac{1}{12\pi}\times10^{-5}$库仑/米^2(C/m^2)
电导率	σ	1/秒	$\frac{1}{9}\times10^{-9}$欧姆/米(Ω/m)
电阻	R	1 秒/厘米	9×10^{11}欧姆(Ω)
电容	C	1 厘米	$\frac{1}{9}\times10^{-11}$法拉(F)
磁通量	Ψ	1 高斯/厘米^2	10^{-8}韦伯(Wb)
磁感应强度	$\boldsymbol{B}$	1 高斯	10^{-4}特斯拉(T)
磁场强度	$\boldsymbol{H}$	1 奥斯特	$\frac{1}{4\pi}\times10^{3}$ 安培•匝/米(A/m)
磁化强度	$\boldsymbol{M}$	1 磁矩/厘米^3	10^3 安培/米(A/m)
电感	L	1	9×10^{11}亨利(H)

表 3　两种单位制主要公式对照表

	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
真空中点电荷的电场	$E=\frac{q}{r^2}$	$E=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{q}{r^2}$
真空中电流的磁场	$\boldsymbol{B}=\frac{1}{c}\int_V\frac{\boldsymbol{J}(r')\times\boldsymbol{R}}{R^3}\mathrm{d}\tau'$	$\boldsymbol{B}=\frac{\mu_0}{\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{J}(r')\times\boldsymbol{R}}{R^3}\mathrm{d}\tau'$
洛伦兹力	$\boldsymbol{F}=q\left(\boldsymbol{E}+\frac{1}{c}\boldsymbol{v}\times B\right)$	$\boldsymbol{F}=q(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})$
麦克斯韦方程组	$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=4\pi\rho$ $\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$ $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$ $\nabla\times\boldsymbol{H}=\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}+\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J}$	$\nabla\cdot\boldsymbol{D}=4\rho$ $\nabla\times\boldsymbol{E}=-\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t}$ $\nabla\cdot\boldsymbol{B}=0$ $\nabla\times\boldsymbol{H}=\frac{\partial\boldsymbol{D}}{\partial t}+\boldsymbol{J}$
边值关系	$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1)=4\pi\sigma$ $\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)=0$ $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)=0$ $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)=\frac{4\pi}{\boldsymbol{c}}\boldsymbol{K}$	$\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{D}_2-\boldsymbol{D}_1)=\sigma$ $\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{B}_2-\boldsymbol{B}_1)=0$ $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{E}_2-\boldsymbol{E}_1)=0$ $\boldsymbol{n}\times(\boldsymbol{H}_2-\boldsymbol{H}_1)=\boldsymbol{K}$
介质电磁性质	$\boldsymbol{D}=\boldsymbol{E}+4\pi\boldsymbol{P}$ $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{H}+4\pi\boldsymbol{M}$	$\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}+\boldsymbol{P}$ $\boldsymbol{B}=\mu_0\boldsymbol{H}+\mu_0\boldsymbol{M}$

续表

	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
电磁场能流密度	$\boldsymbol{S}=\frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$	$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}$
电磁场能量密度	$u=\frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})$	$u=\frac{1}{2}(\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{H}\cdot\boldsymbol{B})$
电磁场动量密度	$g=\frac{1}{4\pi c}\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$	$g=\varepsilon_0\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{B}$
场和势的关系	$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$ $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$	$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}$ $\boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}$
达朗贝尔方程	$\nabla^2\boldsymbol{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=-\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{J}$ $\nabla^2\Phi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}=-4\pi\rho$	$\nabla^2\boldsymbol{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=-\mu_0\boldsymbol{J}$ $\nabla^2\Phi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2}=-\rho/\varepsilon_0$
洛伦兹条件	$\nabla\cdot A+\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi}{\partial t}=0$	$\nabla\cdot A+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\Phi}{\partial t}=0$
推迟势	$\boldsymbol{A}=\frac{1}{c}\int_V\frac{\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}',t-R/c)}{R}\mathrm{d}\tau'$ $\Phi=\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t-R/c)}{R}\mathrm{d}\tau'$	$\boldsymbol{A}=\frac{\mu_0}{4\pi}\int_V\frac{\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}',t-R/c)}{r}\mathrm{d}\tau'$ $\Phi=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_V\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t-R/c)}{R}\mathrm{d}\tau'$
电磁场张量	$F_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0 & B_3 & -B_2 & -\mathrm{i}E_1\\ -B_3 & 0 & B_1 & -\mathrm{i}E_2\\ B_2 & -B_1 & 0 & -\mathrm{i}E_2\\ \mathrm{i}E_1 & \mathrm{i}E_2 & \mathrm{i}E_3 & 0\end{pmatrix}$	$F_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}0 & B_3 & -B_2 & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_1\\ -B_3 & 0 & B_1 & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_2\\ B_2 & -B_1 & 0 & -\frac{\mathrm{i}}{c}E_3\\ \frac{\mathrm{i}}{c}E_1 & \frac{\mathrm{i}}{c}E_2 & \frac{\mathrm{i}}{c}E_3 & 0\end{pmatrix}$
四维电流密度	$J_\mu=(\boldsymbol{J},\mathrm{i}c\rho)$	$J_\mu=(\boldsymbol{J},\mathrm{i}c\rho)$
四维势	$A_\mu=(\boldsymbol{A},\mathrm{i}\Phi)$	$A_\mu=(\boldsymbol{A},\frac{\mathrm{i}}{c}\Phi)$
运动带电粒子的势	$\boldsymbol{A}=\frac{ev}{c(r-v\cdot r/c)}$ $\Phi=\frac{e}{r-v\cdot r/c}$	$\boldsymbol{A}=\frac{ev}{4\pi\varepsilon_0c^2(r-v\cdot r/c)}$ $\Phi=\frac{e}{4\pi\varepsilon_0(r-v\cdot r/c)}$
电子经典半径	$r_e=\frac{e^2}{mc^2}$	$r_e=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0mc^2}$
辐射阻尼力	$F_s=\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{v}$	$F_s=\frac{e^2}{6\pi\varepsilon_0c^3}\ddot{v}$

续表

	高斯单位制	SI(MKSA)单位制
精细结构常数	$\alpha=\frac{e^2}{hc}$	$\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}$
真空中光速	$c=2.9979245\times10^{10}\mathrm{cm/s}$	$c=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0\mu_0}}=2.9979245\times10^{8}\mathrm{m/s}$
真空介电常数	$\varepsilon_0=1$	$\varepsilon_0=8.854187818\times10^{-12}\mathrm{F/m}$
真空磁导率	$\mu_0=1$	$\mu_0=12.5663706144\times10^{-7}\mathrm{H/m}$

附录六　原子在基态时的电子组态

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第一周期	1H	1																		
	2He	2																		
第二周期	3Li	2	1																	
	4Be	2	2																	
	5B	2	2	1																
	6C	2	2	2																
	7N	2	2	3																
	8O	2	2	4																
	9F	2	2	5																
	10Ne	2	2	6																
第三周期	11Na	2	2	6	1															
	12Mg	2	2	6	2															
	13Al	2	2	6	2	1														
	14Si	2	2	6	2	2														
	15P	2	2	6	2	3														
	16S	2	2	6	2	4														
	17Cl	2	2	6	2	5														
	18Ar	2	2	6	2	6														

续表

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第四周期	19K	2	2	6	2	6		1												
	20Ca	2	2	6	2	6		2												
	21Sc	2	2	6	2	6	1	2												
	22Ti	2	2	6	2	6	2	2												
	23V	2	2	6	2	6	3	2												
	24Cr	2	2	6	2	6	5	1												
	25Mn	2	2	6	2	6	5	2												
	26Fe	2	2	6	2	6	6	2												
	27Co	2	2	6	2	6	7	2												
	28Ni	2	2	6	2	6	8	2												
	29Cu	2	2	6	2	6	10	1												
	30Zn	2	2	6	2	6	10	2												
	31Ga	2	2	6	2	6	10	2	1											
	32Ge	2	2	6	2	6	10	2	2											
	33As	2	2	6	2	6	10	2	3											
	34Se	2	2	6	2	6	10	2	4											
	35Br	2	2	6	2	6	10	2	5											
	36Kr	2	2	6	2	6	10	2	6											

续表

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第五周期	37Rb	2	2	6	2	6	10	2	6			1								
	38Sr	2	2	6	2	6	10	2	6			2								
	39Y	2	2	6	2	6	10	2	6	1		2								
	40Zr	2	2	6	2	6	10	2	6	2		2								
	41Nb	2	2	6	2	6	10	2	6	4		1								
	42Mo	2	2	6	2	6	10	2	6	5		1								
	43Tc	2	2	6	2	6	10	2	6	5		2								
	44Ru	2	2	6	2	6	10	2	6	7		1								
	45Rh	2	2	6	2	6	10	2	6	8		1								
	46Pd	2	2	6	2	6	10	2	6	10										
	47Ag	2	2	6	2	6	10	2	6	10		1								
	48Cd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2								
	49In	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	1							
	50Sn	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	2							
	51Sb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	3							
	52Te	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	4							
	53I	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	5							
	54Xe	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6							

续表

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第六周期	55Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			1				
	56Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2				
	57La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6	1		2				
	58Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10	1	2	6	1		2				
	59Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	3	2	6			2				
	60Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	4	2	6			2				
	61Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	5	2	6			2				
	62Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	6	2	6			2				
	63Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6			2				
	64Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10	7	2	6	1		2				
	65Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	9	2	6			2				
	66Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10	10	2	6			2				
	67Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10	11	2	6			2				
	68Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10	12	2	6			2				
	69Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	13	2	6			2				
	70Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6			2				

续表

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第六周期	71Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	1		2				
	72Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	2		2				
	73Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	3		2				
	74W	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	4		2				
	75Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	5		2				
	76Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	6		2				
	77Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	7		2				
	78Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	9		1				
	79Au	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		1				
	80Hg	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2				
	81Tl	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1			
	82Pb	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2			
	83Bi	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3			
	84Po	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4			
	85At	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5			
	86Rn	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6			

续表

电子壳层		K	L		M			N				O				P			Q	
支壳层		1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	7s	7p
第七周期	87Fr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		1	
	88Ra	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		2	
	89Ac	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	2	
	90Th	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	2	
	91Pa	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2	2	6	1	2	
	92U	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3	2	6	1	2	
	93Np	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4	2	6	1	2	
	94Pu	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	6	2	6		2	
	95Am	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6		2	
	96Cm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7	2	6	1	2	
	97Bk	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	9	2	6		2	
	98Cf	2	3	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10	2	6		2	
	99Es	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11	2	6		2	
	100Fm	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12	2	6		2	
	101Md	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	13	2	6		2	
	102No	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6		2	
	103Lr	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14	2	6	1	2	

英文词目索引

A

B

C

D

E

G

H

I

L

M

N

O

P

Q

R

S

U

V

Z

中文词目索引

A

B

C

D

E

F

G

H

J

K

L

M

N

O

P

Q

R

S

T

Y

Z

非汉字字符开头的词目